纯粹数学与应用数学专著　第33号

数论方法在统计中的应用

方开泰　王　元　著

科学出版社

(京)新登字092号

内 容 简 介

本书描述了一系列应用统计问题，这些问题都可以用数论方法来解决．阐述了计算各种统计分布的概率与矩的数值方法，均匀设计方法、介绍了SNTO程序用来寻找有界闭区域上一个连续函数整体极大与极大值点，给出了一些寻找许多著名多元分布的代表点的方法，及数论方法与投影追踪法的结合，统计推断的一些新方法，附录中给出维数18之内 *glp* 集合的生成矢量，均匀设计表，及一些理论结果的证明．

本书英文版由英国 Chapman and Hall 出版．

本书可供大学统计系学生、研究生、教师阅读，也可供科研工作者、应用统计工作者参考．

Number-theoretic Methods in Statistics
Chapman and Hall, 1994

纯粹数学与应用数学专著 第33号
数论方法在统计中的应用
方开泰 王元 著
责任编辑 毕颖
科学出版社出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码：100717
中国科学院印刷厂印刷
新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售
*
1996年1月第一版 开本：850×1168 1/32
1996年1月第一次印刷 印张：10 5/8 插页：2
印数：1–1000 字数：273000

ISBN 7-03-004886-5/O·822

定价：25.00元

序　言

这本书包含了作者过去 17 年的某些研究工作. 我们的工作开始于 1976 年, 在那时, 第一位作者正在研究合金钢标准化问题, 其中需计算很多 5 维正态分布的概率, 因通常的近似计算多重积分的方法都显得无效, 于是他询问第二位作者关于数值积分的数论方法问题. 这样一来, 他的问题被数论方法加以解决了. 数论方法 (NTM) 的实质是在 s 维单位立方体上找到一个点集, 它是均匀散布的, 这个集合可以用来代替蒙特卡罗方法中的随机数. 这两位作者随后就意识到这个想法还可以用于一些其他问题, 例如, 试验设计中的问题.

1978 年, 中国导弹研究部门向作者提出一个试验设计问题, 其中共有六个因子, 每个因子至少要考虑 12 个水平. 因实验耗费很昂贵, 他们要求设计出不超过 50 个实验的有效试验设计. 这就引导了我们研究如何利用数论方法来安排试验的问题, 于是我们建议了一个所谓"均匀设计"的试验设计方法. 将均匀设计用于这个问题, 每个因子有 31 个水平, 只安排了 31 次实验即得到了满意的结果. 此后, 均匀设计逐渐在中国的农业、纺织工业、手表工业、自然科学与军事科学研究等得到普及与应用.

1978 年, 另一个中国工业部门要求我们解决一个典型的几何概率问题. 一方面很难得到这个问题的解析解, 另一方面, 如果用蒙特卡罗方法进行模拟, 则精度又欠佳, 所以我们又用数论方法来尝试, 其结果与蒙特卡罗方法得到的结果相比较, 机器时间仅为 1/100 而精度却提高了一位数字. 受到这些成果的鼓舞, 我们决定在北京中国科学院中组织一个"数论在统计中的应用"的研究小组. 一些年轻研究生魏刚、袁克

海与张金廷、副研究员方碧琪、教授朱尧辰是我们小组的成员，他们的一些工作也包含在本书中． 1991 年，我们得到香港政府基金的资助，叶扶德、朱力行、吴启宏博士等参加了研究并获得了许多新的结果．

本书将阐述数论方法的思想及其在统计中的应用．因为我们主要着眼于应用，所以一些有用的结果的证明仅仅放在本书的附录 B 中．关于有关的数论结果，读者可以去看华罗庚与王元〔 Hua and Wang (1981) 〕的专著．本书只假定读者有微积分的背景及大学统计课的水平．

我们在第一章中描述了一系列应用统计问题，它们可以作为“数论在统计中的应用”的典型问题背景．所有这些问题都可以用数论方法来满意地加以解决．此外，我们将叙述数论方法的含义及在 s 维立方体、球面、球体与单纯形上寻找均匀散布点集的方法．在第二章中，我们将阐述计算各种统计分布的概率与矩的数值方法，这些分布中也包括信息数据所要求的在一个球与单纯形上的统计分布．在第三章，我们介绍一个所谓的 SNTO 程序用来寻找有界闭区域上一个连续函数的整体极大与极大值点． SNTO 可以用来处理多峰函数的最优化问题，而且不要求函数有连续微商．我们还将给出 SNTO 在极大似然估计、似然比统计量、非线性回归、稳健回归等上的许多应用．一个连续多元分布常常要求一个有限点集作为它的代表，而这个集合则要求包括分布较多的统计性质． F-偏差与均方差被用来作为点集的代表性的度量．用这两个度量，我们在第四章中给出一些寻找许多著名多元分布的代表点的方法，其中包括椭球对称分布，多元 l_1- 范数对称分布及多元 Liouville 分布类等．在这章中，我们还给出数论方法在统计模拟问题上的应用，所以一些困难的几何概率问题可以用这种办法来解决．在第五章，我们介绍均匀设计方法的思想．这个方法也可以用于带混料试验，其中因子是互依的．在最后一章，我们给出数论方法与投影追踪法的结合，然后给出

统计推断的一些新方法，例如多元正交性的检验、平均矢量的稳健估计等. 一些结果是首次在本书发表的. 为了帮助读者了解数论方法的理论及其应用，在本书附录中，我们给出维数 18 之内 *glp* 集合的生成矢量、均匀设计表，及一些理论结果的证明.

我们衷心感谢以下机构，他们对我们提供了经费支持，或电脑与其他设施的支持：中国国家自然科学基金会；中国科学院数学研究所及应用数学研究所；香港 UPGC 基金，香港大学 Sino-British 交换学者基金，香港中文大学伟伦基金与联合基金，香港浸会学院科学基金，香港政府基金，纽约大学(石溪) CEEC Glorious Sun 学者基金，及美国公共健康中心的 DA01070 基金. 本书的一些材料，作者已在 1990 年第一届亚洲数学大会，1990 年国际泛华统计学会召开的第一届统计最近发展及 1992 年多元分析及其应用国际会议上的邀请报告中发表过；也在 North Carolina 大学 (Chapel Hill) 、 Florida 大学、 California 大学 (Los Angeles) 、香港中文大学及香港大学等报告过. 在此我们对很多参加者的宝贵意见致以感谢. 对于 Stanford 大学的 T.W.Anderson 与 I. Olkin 教授， California 大学 (Los Angeles) 的 P.M. Bentler 教授，Toronto 大学的 P.A.S. Fer 教授， Georgia 技术学院的 Y.L. Tong 教授与 Maryland 大学的 Grace Yang 教授的鼓励与帮助，我们致以衷心感谢. 作者由衷感谢香港浸会学院副校长曾宪博教授与理学院院长吴清辉教授的支持与鼓励. 吴启宏博士对本书给予了很多宝贵的帮助. 秦宇红女士承担了中文版的排版工作，在此深表谢意.

方开泰

香港浸会学院数学系

北京，中国科学院应用数学研究所　100080

王　元

北京，中国科学院数学研究所　100080

目 录

第一章　数论方法导引

§1.1　统计问题

统计在 20 世纪有了巨大的发展，许多有效的统计方法成为各门科学研究的强有力工具．当今自然科学、社会科学、工业与商业中不断涌现出新问题，这些问题有下面的特性：(a) 多元性，(b) 非正态性，(c) 非线性，(d) 有异常数据与 (e) 有丢失数据．这些复杂性需要我们发展更为强有力的统计方法，从而需要愈来愈多的纯粹数学的工具与结果．近 15 年来，微分几何与群论在统计中有广泛的应用并获得丰硕的成果，例如 Efron (1975), Amari (1985, 1987), Eaton (1989) 与 Diaconis (1989)．本书旨在介绍所谓的 **数论方法** (NTM), 它可以用来解决一系列统计问题，其中有些问题是人们长期以来试图用其他方法，但并未获得满意解答的． NTM 或称 **伪蒙特卡罗方法** 是数论与近似分析交叉的产物．就像许多交叉学科一样，有其自身的魔力与吸引人之处．数论方法的广泛应用导源于数值积分，并成功地应用于与之有关的问题如插值法，积分方程与微分方程的数值解法等． Korobov (1963), 华罗庚与王元 (1961, 1963, 1981) 与 Niederreiter (1978b, 1988, 1992) 给出了这一方法详细的文献．

尽管 NTM 与 **蒙特卡罗方法** 有密切关系，但在过去，只有少数统计学家研究数论方法及其在统计中的应用． NTM 在统计中的第一个应用自然是计算多元分布的概率与矩 (例如方开泰与吴传义 (1979), 张尧庭与方开泰 (1982))．方开泰 (1980) 及王元与方开泰 (1981), 首先将 NTM 的想法用于试验设计．他们提出了一个新的设计，即均匀设计，这或许是数值积分之后， NTM 在统

计中的第一个应用. 自此以后, 均匀设计在中国的许多领域均获得了应用与成果. Shaw (1988) 给出 NTM 用于贝叶斯 (Bayes) 统计的详细讨论, 特别是关于后验分布的数值计算. 最近王元, 方开泰, 袁克海与 Bentler (王元与方开泰 (1990a, 1990b, 1992), 方开泰与王元 (1991) 及方开泰, 袁克海与 Bentler (1990, 1992)) 系统地研究了 NTM 在统计中的应用. 这一方向吸引了愈来愈多的统计学家及从事应用统计学的人, 他们的经验表明 NTM 是一个强有力的工具.

读者可能有这样的问题: 什么是数论方法? 它是怎样用于统计中的各种问题的? 我们将在本节介绍本书中所要讨论的一些统计问题及解决这些问题的主要想法, 并阐明所有这些问题均可以归结为一个关键问题: 如何在 s 维单位立方体 C^s 上找出一个均匀散布的点集?

注意这里所提的点集"均匀散布"的大意是指该点集在 Weyl (1916) 意义下的偏差较小, 而不是统计意义下的均匀分布集合.

1.1.1 多元分布的概率与矩的计算

假定 s 维随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 有一个连续**概率密度函数** (**p.d.f.**) $p(\boldsymbol{x})$, 其落在区域 D 上的概率为

$$p = \int_D p(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}. \tag{1.1.1}$$

通常 D 为一个 s 维矩形 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}] = [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_s, b_s]$, 所以

$$p = \int_{a_1}^{b_1} \cdots \int_{a_s}^{b_s} p(x_1, \cdots, x_s)\, dx_1 \cdots dx_s. \tag{1.1.2}$$

这一积分可以化为标准形式

$$I(f) = \int_{C^s} f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(x_1, \cdots, x_s)\, dx_1 \cdots dx_s. \tag{1.1.3}$$

此处 $f(\boldsymbol{x})$ 为单位立方体 C^s 上的连续函数. 如果得不到 I 的解

析表达式，则我们通常用蒙特卡罗方法中的 **样本均值法** 去近似计算 $I=I(f)$，即

$$I \approx \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\boldsymbol{y}_k), \tag{1.1.4}$$

此处 $\{\boldsymbol{y}_k\}$ 为 C^s 上均匀分布的一个随机样本，即 $\boldsymbol{y}_1,\cdots,\boldsymbol{y}_n$ 独立同分布 (i.i.d.) 并遵从在 C^s 上均匀分布 $U(C^s)$. 蒙特卡罗方法的效率不高，即只有当 n 很大时，由 (1.1.4) 才能得到好的逼近. 第二章将指出，当 $I(f^2)<\infty$ 时，在概率意义下，蒙特卡罗方法的平均收敛速度为 $O(1/\sqrt{n})$，而在任何情况下亦不低于 $O(\sqrt{\ln(\ln(n))/n})$.

为什么蒙特卡罗方法的效率这样低？关键在于 $\{\boldsymbol{y}_k\}$ 在 C^s 上的散布不是很均匀的. 例如图 1.1 (a) 表示用蒙特卡罗方法在 $U(C^2)$ 中得到的一个大小为 17 的样本点图，而图 1.1 (b) 则为由 NTM 得到的 17 个点的点图. 易见后者在 C^2 上的散布较前者均匀. "均匀散布" 的精确定义将在 1.2 节中给出.

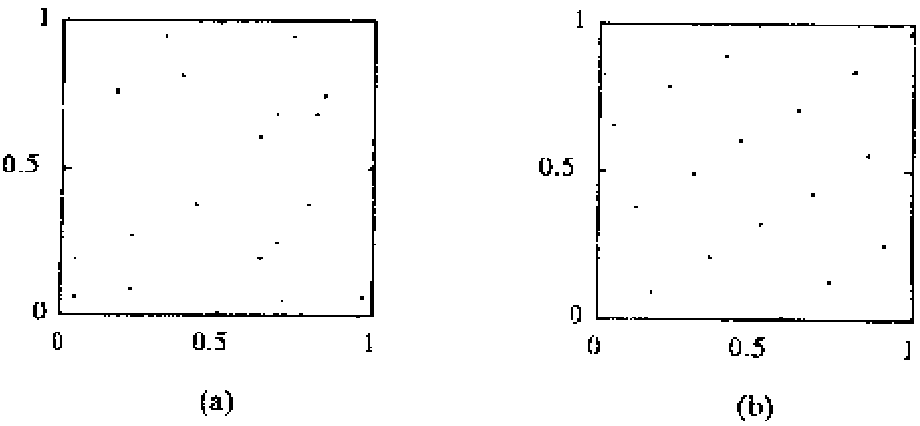


图 1.1　由蒙特卡罗方法与 NTM 生成点集的位置

命 $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{c}_1,\cdots,\boldsymbol{c}_n\}$ 为由 NTM 得到的 C^s 上均匀散布的一个点集. 由于它们比由随机数得到的点 $\{\boldsymbol{y}_k\}$ 散布得更均匀，所以可以用它们来代替 (1.1.4) 中的 $\{\boldsymbol{y}_k\}$，于是得到

$$I \approx I(f,n) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\mathbf{c}_k), \tag{1.1.5}$$

第二章中，我们将证明存在 $\mathcal{P}$ 使 $|I(f,n)-I| = O(n^{-1}(\log n)^{s-1})$. 这比由蒙特卡罗方法构造的 (1.1.4) 在概率意义下的误差阶 $O(n^{-\frac{1}{2}})$ 好多了.

显然我们可以应用 NTM 的数值积分方法来计算多元分布的函数，例如矩，后验概率与某些贝叶斯统计中的有关矩.

用 NTM 来近似计算 C^s 上多重积分的关键问题是选取一个 C^s 上均匀散布的点集. 为此目的，数学家们建议了不少有效的 NTM, 例如 Korobov (1959a, 1963), 华罗庚与王元 (1960, 1964, 1965), Hlawka (1962) 与 Halton (1960), 我们将在 1.3 节中介绍这些方法.

假定随机向量 $\boldsymbol{x}$ 在 R^s 的一个区域 D 上分布. D 可以是 s 维球面，球体或单纯形. 求 D 上的概率与矩的问题归结为下面形状的积分的数值计算问题

$$I(f,D) = \int_D f(\boldsymbol{x})\,dv, \tag{1.1.6}$$

此处 dv 表示 D 的体积元素. 例如当 D 为 s 维单位球面时，则研究 D 上的分布是 **方向数据分析** 的统计基础 (Mardia (1972), Watson (1983)). 若 D 为单纯形

$$T_s = \{(x_1,\cdots,x_s):\ x_i \geq 0,\ i=1,\cdots,s,\ x_1+\cdots+x_s=1\}, \tag{1.1.7}$$

则来自 D 上一个分布的一个观察值就称为一个 **配方**. Aitchison (1986) 详尽地给出了 **配方数据** 的统计分析.

王元与方开泰 (1990a) 建议了下面的方法来近似计算 $I(f, D)$: **指标函数法**, **变换法** 与 **直接法**. 类似于蒙特卡罗方法的 **成败** (hit-miss) **法**, 我们可以发展所谓 **NT-成败法** (§4.7). 这些方法的关键为找一个在 C^s 或 D 上均匀散布点集. 我们将在第二章与第四章作详细讨论.

1.1.2 最优化与统计

最优化与统计之间有着密切的关联，统计中的许多问题，例如最大似然估计，回归分析中的参数估计，最优试验设计与最优量化等，均可以化为最优化问题.

假定 D 为 R^s 中的一个有界闭区域，$f(\boldsymbol{x})$ 为 D 上的一个连续函数. 今往寻求一个点 $\boldsymbol{x}^* \in D$ 使

$$M = f(\boldsymbol{x}^*) = \max_{\boldsymbol{x} \in D} f(\boldsymbol{x}). \tag{1.1.8}$$

现在我们来讨论统计中出现的一些最优化问题.

(a) 最大似然估计 (MLE)

假定 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 为来自总体 p.d.f. $g(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\phi})$ 的一个样本，此处参数 $\boldsymbol{\phi} \in \Theta \subset R^s$, 其中 Θ 称为**参数空间**. 则 $\boldsymbol{\phi}$ 的 MLE $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 为使**似然函数**

$$L(\boldsymbol{\phi}) = \prod_{i=1}^{N} g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\phi}) \tag{1.1.9}$$

在 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 达到其极大，即

$$L(\hat{\boldsymbol{\phi}}) = \max_{\boldsymbol{\phi} \in \Theta} L(\boldsymbol{\phi}). \tag{1.1.10}$$

当总体为正态分布时，$\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 有解析表达式. 若总体分布为非正态时，一般说 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 没有解析表达式. 例如，威布尔分布，贝塔分布或哥西分布，这时 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 只能由数值方法求得. 因似然函数一般都是非单峰的，所以由传统的方法很难求出 $\boldsymbol{\phi}$ 的 MLE.

(b) **似然比统计量**

考虑总体有 p.d.f. $g(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\phi})$ 的参数假设检验

$$H_0 : \boldsymbol{\phi} \in \omega \subset \Theta, \quad H_1 : \boldsymbol{\phi} \notin \omega, \quad \boldsymbol{\phi} \in \Theta, \tag{1.1.11}$$

其**似然比准则**为

$$\lambda = \frac{\sup_{\boldsymbol{\phi} \in \omega} L(\boldsymbol{\phi})}{\sup_{\boldsymbol{\phi} \in \Theta} L(\boldsymbol{\phi})}. \tag{1.1.12}$$

其中表达式的分子与分母均涉及到最优化问题.

(c) **稳健回归与非线性回归**

考虑回归模型

$$EY = h(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\phi}), \qquad \boldsymbol{\phi} \in \Theta \subset R^s, \tag{1.1.13}$$

此处 $\boldsymbol{\phi}$ 为回归参数矢量或回归系数矢量. 回归分析的主要任务之一是由观察值 $\{Y_i, \boldsymbol{x}_i, i=1,\cdots,N\}$ 来估计 $\boldsymbol{\phi}$. 命

$$Q(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{i=1}^{N}(Y_i - h(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\phi}))^2. \tag{1.1.14}$$

则广泛使用的 **最小二乘估计** $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 满足

$$Q(\hat{\boldsymbol{\phi}}) = \min_{\boldsymbol{\phi}\in\Theta} Q(\boldsymbol{\phi}). \tag{1.1.15}$$

若 h 为 $\boldsymbol{\phi}$ 的线性函数, 则 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 有解析表达式. 否则我们只能用非线性最优化数值方法以求出最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ (Ratkowsky (1983), Nash 与 Walker-Smith (1987)).

近年来 **稳健回归** 引起愈来愈多的注意, (1.1.14) 中函数 $Q(\boldsymbol{\phi})$ 常常被换成一个更为 **稳健的函数**

$$Q_1(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{i=1}^{N}|Y_i - h(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\phi})|, \tag{1.1.16}$$

或更一般的

$$Q_2(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{i=1}^{N} u(Y_i, h(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\phi})). \tag{1.1.17}$$

此处 $u(x,y) > 0$ 为满足某些性质的 x, y 的函数 (Huber (1972), Hampel 等 (1986)). 由于在 $Q_1(\boldsymbol{\phi})$ 的表达式中出现了绝对值运算, 所以当用牛顿型方法来求 $\boldsymbol{\phi}$ 的 **稳健估计** $\hat{\boldsymbol{\phi}}^*$ 使

$$Q_1(\hat{\boldsymbol{\phi}}^*) = \min_{\boldsymbol{\phi}\in\Theta} Q_1(\boldsymbol{\phi}). \tag{1.1.18}$$

成立时，将会遇到困难．通常参数空间 Θ 是 R^s 或矩形 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$，此处 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\in R^s$．有时 $\Theta\subset R_+^s$，其中

$$R_+^s=\{(x_1,\cdots,x_s):x_i\geq 0,\ i=1,\cdots,s\}. \tag{1.1.19}$$

在这种情况下，无论是 $\boldsymbol{\phi}$ 的最小二乘估计或稳健估计都没有解析解．好几个学者 (Boot (1964), Waterman (1974), 方开泰，王东谦和吴国富 (1982) 与方开泰与贺曙东 (1985)) 建议了不同的方法来处理这个问题．

所有上述的统计问题都是最优化问题 (1.1.8) 的特例．在优化理论中有许多数值方法可以用于这个问题，例如牛顿 - 高斯方法，单纯形方法，截尾牛顿方法与共轭梯度方法．对于这些方法，函数 f 需要假定为单峰，否则仅可得到一个局部极值．但在统计中出现的函数往往不是单峰的．进而言之，通常的方法还需假定 f 有一阶或二阶微商．若在 $f(\boldsymbol{x})$ 的表达式中含有 "max", "min" 与 $|x|$，则在有些点上微分不存在．最近涌现出许多寻求整体极值的方法 (Horst 与 Tuy (1990))．另一方面，在过去的 20 年中蒙特卡罗最优化方法也很活跃 (Rubinstein (1986))．但是我们可以将 NTM 用于最优化并用于统计．这对于其他方法来说多了一个竞争对手．

下面的计算程序很简单：命 $\mathcal{P}_n=\{\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 为 D 上的一个均匀散布点集．命

$$M_n=\max_{1\leq k\leq n} f(\boldsymbol{x}_k)=f(\boldsymbol{x}_{k_n}) \tag{1.1.20}$$

为 f 在 $\mathcal{P}_n$ 上的最大值，$\boldsymbol{x}_{k_n}$ 表示 $\mathcal{P}_n$ 中的一个点它使 f 达到在 $\mathcal{P}_n$ 中的最大值．显然当 $n\to\infty$ 时，$M_n\to M$，所以当 n 充分大时有 $M_n\cong M$ 及 $\boldsymbol{x}_{k_n}\cong\boldsymbol{x}^*$．

使用最优化中的 NTM 有许多有利之处．首先只需要假定函数 f 是连续的而不需要假定函数是单峰与可微的．所以这个方法特别适合于寻求有多个局部极大的函数的最大值．其次 NTM 只要计算函数 f 在 $\mathcal{P}_n$ 上的值，而不需要求 f 的微商值，所以

计算程序对函数 f 本身的依赖很轻微. 例如若 f 取 (1.1.14) 中的函数 $Q(\phi)$ 时我们得到 ϕ 的最小二乘估计, 同样的程序如果取 f 为 $Q_2(\phi)$ 则可得 ϕ 的稳健估计. 所以对上述两个问题程序的差异仅在 $Q(\phi)$ 与 $Q_2(\phi)$ 的表达式不同. 第三, NTM 不象传统的数值方法, 它不依赖于初始值的选取.

不幸的是, 理论与实际的结果都表示 M_n 收敛于 M 的速度不快. 为了提高 NTM 的效率, 当 D 为矩形时我们将在 §3.2 建议一个序贯算法, 这一方法称之为 **SNTO**, 它可大大地节省计算量. 在第三章, 我们将给出 SNTO 用于参数的 MLE, 假设检验的似然比及回归参数的各种估计与应用.

当 D 不是矩形时, 设它可以用 C^t 映射至 D, 我们仍可用 SNTO 的变体以寻求函数 f 在 D 上的极大 M 及对应点 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似. 由矩形上的 SNTO 出发, 我们将给出这一方法在球面, 球体与单纯形上的变体. 在 §3.5–3.8, 我们将给出这一方法的许多应用.

1.1.3 连续分布的代表点

用 NTM 得到的 C^s 上的均匀散布点集通常称为 **伪随机数集合**或 **数论网格** (**NT 网** 或 **NT–net**), 这是由于这个点集在许多统计问题中可以用来代替随机数. 实际上, NT-net 可以看作是均匀分布 $U(C^s)$ 的 **代表点** (**rep–points**). 因此本书中, 我们也称它们为 $U(C^s)$ 的代表点, 或更简单地称为代表点. 代表点比随机数有一些优点. 任给一个分布, 它的代表点的定义将在 §1.2 给出.

因此, 我们希望得到各种一元与多元统计分布的代表点. 结合 NTM 与蒙特卡罗方法, 我们能够生成各种分布的代表点. 单位球面与单位单纯形上均匀分布的代表点对生成其他许多分布的代表点是极端重要的. 我们将在 §4.2 详细加以讨论.

在文献中还有另一类代表点, 出现在信息论, 聚类分析与试验设计之中. 命 $F(x)$ 为一个 **累积分布函数** (c.d.f.), 不失一般性

我们可以假定 $F(x)$ 的方差为 1. 给定正整数 s, 我们需要寻求 s 个数 $x_1, \cdots, x_s$ 使它们能提供 $F(x)$ 最多的信息. 我们经常用**均方误差**

$$\mathrm{MSE}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{MSE}(x_1, \cdots, x_s) = \int_{-\infty}^{\infty} \min(x_i - x)^2 p(x)\, dx \quad (1.1.21)$$

来度量 $\{x_i\}$ 的代表性, 此处 $p(x)$ 为 $F(x)$ 的 p.d.f. 不失一般性, 我们可以假定 $x_1 < \cdots < x_s$. 命

$$A_s(R) = \{(x_1, \cdots, x_s) : -\infty < x_1 < \cdots < x_s < \infty\}. \quad (1.1.22)$$

假定 $\boldsymbol{x}^* \in A_s(R)$ 使 $\mathrm{MSE}(\boldsymbol{x}^*)$ 为 $\mathrm{MSE}(\boldsymbol{x})$ 在 $A_s(R)$ 上之极小, 即

$$\mathrm{MSE}(\boldsymbol{x}^*) = \min_{\boldsymbol{x} \in A_s(R)} \mathrm{MSE}(\boldsymbol{x}). \quad (1.1.23)$$

则我们称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $F(x)$ 的大小为 s 的 **mse-代表点**.

人们已经求出 $(0, 1)$ 上的均匀分布、正态分布, Rayleigh 分布与 Laplace 分布的 mse- 代表点. 值得提出的是我们将在第四章给出一个用 NTM 寻求各种 mse- 代表点一般算法, 该法有很高的精度.

若 $F(\boldsymbol{x})$ 是一个多元 c.d.f. 则我们可以类似地定义 mse- 代表点, 但相比于刚才讲到的一元情况, 寻求多元 mse- 代表点是有本质困难的. 我们将在第四章建议一个寻求连续多元分布的 mse- 代表点的数值方法.

1.1.4 试验设计与均匀设计

在自然科学, 制造工业, 农业试验及质量管理中, **试验设计**有广泛的应用. 通常, 试验设计要求满足下面的规则:

(a) 均匀性: 试验点在试验区域中是均匀散布的, 即这些点有很好的代表性.

(b) 正则性: 试验点的散布适合某些正则条件, 使方便于对试验数据作方差分析.

正交设计 与 **BIB 设计** 都是按照上面的原则产生的方法，但有时为了满足规则 (b) 必须做大量试验，例如，如果在一个试验中，一个因素的水平个数是 12, 则用正交设计至少要安排 $144 = 12^2$ 个试验．这对于大多数试验来说，试验次数实在太多了．能否将试验次数减少，并仍能保证获得好的结果呢？事实上，试验设计的宗旨就是在试验区域中找到有限多个点，使在这些点上的试验具有很好的代表性．这个宗旨与重积分近似计算及在一个区域中寻求一个函数的整体极值问题的宗旨是完全一致的．如果我们抛弃原则 (b) 而仅仅保持原则 (a)，则我们可以用 NTM 得到的试验区域 D 上的一组均匀散布的点列来安排试验．我们称这个试验设计方法为 **均匀设计** (UD) (王元与方开泰 (1981, 1990a))．当水平数较大时，UD 中需要的试验次数相比于已知的试验设计方法是大大地降低了．在中国的手表制造业，纺织，军事与农业领域中，UD 的应用获得了不少好的结果．我们将在第五章介绍 UD 及其数据分析．

1.1.5 几何概率与模拟

在 **几何概率** 与 **模拟** 中，我们经常遇到这样的问题：假定 D 是 R^s 中的一个有界闭区域，例如 D 是一个 s 维单位球体．我们如何在 D 上找一个有 N 个点的集合 $\mathcal{P}$ 来代表 D？假定 T 是 D 上的一个统计量，在模拟过程中，$\mathcal{P}$ 中有 M 个点按照 T 的定义被覆盖，则 M/N 可以近似地看成 T 的样本．在图 1.2 中，D 是单位圆，它被两个随机圆覆盖．T 是 D 中被覆盖的区域．如果 D 是一个矩形，则人们常常用 **均匀格子点集** 来代表 D. 当 D 不是矩形时，一般很难在 D 上找出 N 个点来，使它们在 D 上均匀散布并能代表 D. 例如，若 D 是一个球体，很自然的方法是取 D 的外接正方体 C 并定义 D 的代表点 $\mathcal{P}$ 为由 C 中落于 D 内的点所构成 (图 1.3)．这个方法固然简单但亦有不少缺点：(a) 如果我们在 C 上取一个均匀格子点集，则计算量一般很大．(b) 在 C 上均匀散布的集合，一般说来在 D 上

散布就不一定很均匀. (c) 在实际计算中，D 边界附近的点会引起较大的误差. (d) 若 D 是一个低维流形，例如 D 是一个 $s-1$ 维的球面 U_s, 这时很可能 C 的代表点集中没有一个点落在 D 上，这时上述方法是无效的.

如果我们用 NTM 来产生在 D 上均匀散布的点集，并用它来代表 D (图 1.4), 则上述麻烦就可以避免，所以在这类几何概率与模拟问题中，NTM 是非常有用的. 我们将在 §4.8 与 §4.9 给出两个案例研究，它们用 NTM 均获得满意结果.

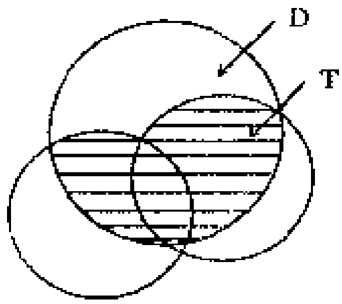


图 1.2 几何概率

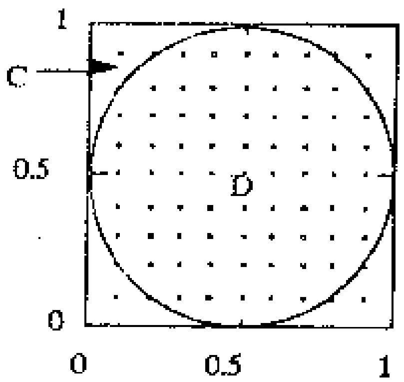


图 1.3 由 C^2 的 NT-net 诱导的 B_2 的 NT-net

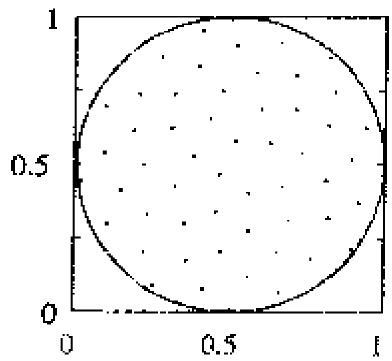


图 1.4 B_2 上的 NT-net

1.1.6 其他

在多元分析中，我们常常用投影法，例如，主分量分析，典型相关分析与**投影追踪**. 值得幸运的是在主分量分析及典型相关分析中，我们可以找到问题解的解析表达式，但在涉及到投影追

踪的许多问题中，我们得不到解析解，必须用数值方法．命 $\boldsymbol{x}$ 为一个 s 维随机矢量，$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a} \in R^s$, 为其一维投影．不失一般性，我们可以假定 $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{a}=1$ 即 $\boldsymbol{a}$ 位于 R^s 的单位球面 U_s 上．命 $t(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})$ 为某一统计量，其中 $t(u)$ 为一个连续标量函数．在投影追踪的许多方法中我们要求找一个 $\boldsymbol{a}_0 \in U_s$ 使 $t(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}_0$ 时达到极值．用 U_s 上一组均匀散布的点集及 SNTO, 我们可以求出 $\boldsymbol{a}_0$ 及 $t(\boldsymbol{a}_0'\boldsymbol{x})$ 的近似值．

例如，熟知检验 $\boldsymbol{x} \in R^s$ 的 **多元正态性** 等价于检验所有 $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}$ 的一维 **正态性**, 此处 $\boldsymbol{a} \in U_s$ (Anderson (1982))．对于每个 $\boldsymbol{a} \in U_s$, 假定 $t(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})$ 是检验一维正态性的一个统计量，且当 $t(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})$ 大时，$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}$ 的正态性较差．若 $\boldsymbol{a}_0$ 为适合

$$t\left(\boldsymbol{a}_0'\boldsymbol{x}\right)=\max_{\boldsymbol{a}\in U_s} t\left(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}\right)$$

的一个矢量，则检验多元正态性就等价于检验 $\boldsymbol{a}_0'\boldsymbol{x}$ 的正态性．NTM 可以用来寻求 $\boldsymbol{a}_0$ 与 $t(\boldsymbol{a}_0'\boldsymbol{x})$ 的近似值．我们将在 §6.3 与 6.4 来讨论这个问题．在 §6.5 我们将用 NTM 来处理更一般的将 R^s 投影到一个低维空间 $R^l, 1 \le l \le s$ 的问题．

事实上，这本书中所介绍的方法不仅对统计中的问题有用，而且对许多其他领域亦然．例如，SNTO 可以用来求解一组有约束条件或没有约束条件的非线性方程组；寻求一个将一个区域映射到自身的连续映射的不动点．至于数值积分，几乎在所有自然科学领域中都是有用的．

§1.2 偏差与 F-偏差

前节我们介绍了统计中许多问题，它们的数值解依赖于 C^s 上一个均匀散布的点集．但在 C^s 上“均匀散布”的含义是什么呢？首先我们需要给出 C^s 上一个集合均匀性的度量，事实上，这是下面问题的一个特例．

命 $F(\boldsymbol{x})$ 为 R^s 中的一个连续多元分布，n 为一个整数．我们需要在 R^s 中找出 n 个点 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 使它们对 $F(\boldsymbol{x})$ 有一个好的代表性．那么，代表性的含义又是什么呢？让我们来考虑代表性的一个度量．

定义 1.1 命 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 为 R^s 中的 n 个点．则函数

$$F_n(\boldsymbol{x})=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}I\{\boldsymbol{x}_i\le\boldsymbol{x}\} \tag{1.2.1}$$

称为 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 的 **经验分布**，其中所有不等式表示不等式两边的矢量的各分量均分别满足该不等式，$I\{A\}$ 为 A 的 **指标函数**，即

$$I\{A\}=\begin{cases}1, & \text{若 } A \text{ 成立},\\ 0, & \text{若 } A \text{ 不成立}.\end{cases}$$

经验分布可以由另一等价方法来定义：命 $\boldsymbol{x}$ 为 R^s 上的随机矢量满足

$$P(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_i)=\frac{1}{n},\qquad i=1,\cdots,n,$$

则 $\boldsymbol{x}$ 的 c.d.f. $F_n(\boldsymbol{x})$ 就称为 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 的经验分布．

定义 1.2 命 $F(\boldsymbol{x})$ 为 R^s 上的一个 c.d.f. 及 $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{x}_k,k=1,\cdots,n\}$ 为 R^s 上的一个点集．则

$$D_F(n,\mathcal{P})=\sup_{\boldsymbol{x}\in R^s}|F_n(\boldsymbol{x})-F(\boldsymbol{x})| \tag{1.2.2}$$

称为 $\mathcal{P}$ 关于 $F(\boldsymbol{x})$ 的 **F–偏差**，此处 $F_n(\boldsymbol{x})$ 为 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 的经验分布．

注记 1.1 显然 F- 偏差是 $\mathcal{P}$ 关于 $F(\boldsymbol{x})$ 的代表性的度量．考虑假设检验 H_0: 总体分布为 $F(\boldsymbol{x})$．则 $D_F(n,\mathcal{P})$ 正是关于 $F(\boldsymbol{x})$ 的拟合优度检验的 **Kolmogorov-Smirnov 统计量**．

当 $F(\boldsymbol{x})$ 为 $\boldsymbol{C}^s=[0,1]^s$ **上的均匀分布** 时，即 $U(C^s)$，则 F- 偏差就归结为文献中普通用的偏差（华罗庚与王元 (1981)），在这种

情况下我们将用 $D(n,\mathcal{P})$ 来表示 F- 偏差. Weyl (1916) 首先提出偏差这一概念并用作 C^s 上一个点集均匀性的度量. 定义 1.2 中更为广泛的概念则是王元与方开泰 (1990a) 建议的.

注记 1.2 在 NTM 的文献中, 偏差定义如下: 命 $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$ 表示 C^s 上的一个点集. 对于 $\boldsymbol{\gamma}\in C^s$ 命 $N(\boldsymbol{\gamma},\mathcal{P})$ 表示 $\mathcal{P}$ 中满足 $\boldsymbol{x}_k\le\boldsymbol{\gamma}$ 的点数. 则

$$D(n,\mathcal{P})=\sup_{\boldsymbol{\gamma}\in C^s}\left|\frac{N(\boldsymbol{\gamma},\mathcal{P})}{n}-v([0,\boldsymbol{\gamma}])\right| \tag{1.2.3}$$

称为 $\mathcal{P}$ 的**偏差**, 其中 $v([0,\boldsymbol{\gamma}])=\gamma_1\cdots\gamma_n$ 表示矩形 $[0,\boldsymbol{\gamma}]$ 的体积. 为简单计, 我们有时用 $D(n)$ 来代替 $D(n,\mathcal{P})$.

图 1.5 给出一个集合的偏差的说明. 如果落在矩形 $[0,\boldsymbol{\gamma}]$ 中的点数与集合总点数之比减去矩形 $[0,\boldsymbol{\gamma}]$ 的体积的绝对值小时, 则点集的散布是均匀的, 这是我们用偏差来作为点集均匀性的度量的直观原因.

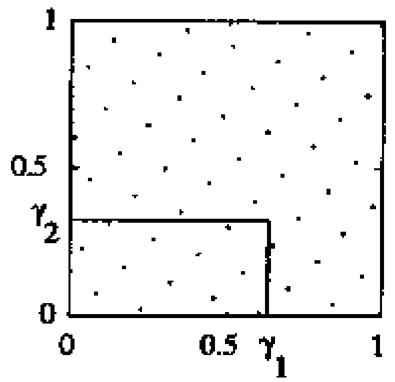


图 1.5 偏差的说明

现在我们来寻找具有最小偏差的点集. 当 $s=1$ 时, 这一问题已得到解决.

例 1.1 命 n 为一个整数 ≥ 1 及

$$Q=\left\{\frac{2i-1}{2n}, i=1,\cdots,n\right\}. \tag{1.2.4}$$

今往证明 $C^1=[0,1]$ 中所有 n 个点构成的集合中, Q 有最小的偏差.

命 $[x]$ 与 $\{x\}$ 分别表示 x 的整数部分与分数部分. 对于 $\gamma \in [0, 1]$, 命 $x = 2n\gamma$. 则

$$
\begin{aligned}
&\frac{N(\gamma, Q)}{n} - \gamma \\
=&\frac{N(\frac{x}{2n}, Q)}{n} - \frac{x}{2n} \\
=&\begin{cases} \dfrac{[x]+1}{2n} - \dfrac{[x]+\{x\}}{2n} = \dfrac{1-\{x\}}{2n}, & \text{若 } 2 \nmid [x], \\ \dfrac{[x]}{2n} - \dfrac{[x]+\{x\}}{2n} = -\dfrac{\{x\}}{2n}, & \text{若 } 2 | [x], \end{cases}
\end{aligned}
$$

此处 $a|b$ 表示 b 是 a 的倍数. 否则我们记为 $a \nmid b$. 因此 $D(n, Q) \le \frac{1}{2n}$. 如果取 $\gamma = \frac{2i-1}{2n}$, 则

$$\frac{N(\gamma, Q)}{n} - \gamma = \frac{i}{n} - \frac{2i-1}{2n} = \frac{1}{2n}.$$

所以 $D(n, Q) = \frac{1}{2n}$.

现令 $\mathcal{P} = \{x_i, i = 1, \cdots, n\}$ 为 $[0, 1]$ 的任一个子集. 不失一般性, 我们可以假定

$$0 \le x_1 \le \cdots \le x_n \le 1.$$

若 $D(n, \mathcal{P}) \le 1/2n$, 则由 (1.2.2) 可知对于任意 γ 皆有

$$
\begin{aligned}
\left|\frac{N(\gamma, Q)}{n} - \gamma\right| &\le \frac{1}{2n}, \\
-\frac{1}{2} + \gamma n \le N(\gamma, \mathcal{P}) &\le \frac{1}{2} + \gamma n.
\end{aligned}
$$

对于满足 $(2i-1)/(2n) < \gamma < (2i+1)/(2n)$ 的 γ, 上面的不等式推出

$$i - 1 < -\frac{1}{2} + \gamma n \le N(\gamma, \mathcal{P}) \le \frac{1}{2} + \gamma n < i + 1,$$

所以 $N(\gamma, \mathcal{P}) = i$. $N(\gamma, \mathcal{P})$ 的这一限制表明 $\mathcal{P}$ 必须就是 (1.2.4) 中定义的 Q. 因此我们证明了如果 $\mathcal{P}$ 不是 Q, 则 $D(n, \mathcal{P}) > 1/2n$.

当 $s \geq 2$ 时，很难找到一个具有最小偏差的点集，这是由于 n 个点在 C^s 中的散布可以是非常复杂的. 因此我们将寻求具有渐近地较小偏差的点集.

数论中有这样一个猜想：对于任何 $n(\geq 2)$ 个点的集合 $\mathcal{P}$, 皆有

$$D(n, \mathcal{P}) \geq c(s) n^{-1} \log^{s-1} n.$$

今后我们用 $c(f, \cdots, g)$ 表示一个仅依赖于 $f, \cdots, g$ 的正常数，但在不同的场合其值亦不同. 当 $s = 2$ 时，这一猜想已由 Schmidt (1972) 解决. 一般情况，我们有下面的 Roth (1954) 定理：

$$D(n, \mathcal{P}) > 2^{-2(s+2)}(s-1)^{-(s-1)/2} n^{-1} (\log_2 n)^{(s-1)/2}. \qquad (1.2.5)$$

所以如果我们能找到一个集合序列 $\mathcal{P}_n$, 此处 $\mathcal{P}_n$ 有 n 个点，而 $D(n, \mathcal{P}_n)$ 的阶近似于 (1.2.5) 的右端，则 $\mathcal{P}_n$ 可以认为是 C^s 上好的均匀散布点集. 更精确些，我们有下面的定义：

定义 1.3 命 $F(\boldsymbol{x})$ 为一个 s 维的连续 c.d.f., $\boldsymbol{N}$ 表示自然数的一个无穷子集及 $\{\mathcal{P}_n, n \in \boldsymbol{N}\}$ 表示 R^s 中具有一定结构的一个点集序列，且 $\mathcal{P}_n$ 有 n 个点. 若

$$D_F(n, \mathcal{P}_n) = o(n^{-1/2}), \qquad n \to \infty, \qquad (1.2.6)$$

则 $\{\mathcal{P}_n\}$ 称为 $F(\boldsymbol{x})$ 的 **代表点** 集合. 当 $F(\boldsymbol{x})$ 为 $U(D)$ 的 c.d.f. 时，其中 D 是一个有界闭区域，则 $\{\mathcal{P}_n\}$ 称为在 D 上 **均匀散布**, 或为 D 上的一个 **NT–net**. 如果对于任意 $\varepsilon > 0$, 皆有

$$D_F(n, \mathcal{P}) = O(n^{-1+\varepsilon}), \qquad (1.2.7)$$

则 $\{\mathcal{P}_n\}$ 称为 D 上 **好的均匀散布集合** 序列.

注记 1.3 在 NTM 的文献中，大部分作者是这样定义 $\mathcal{P}_n$ 在 C^s 上“均匀分布”的，即当 $n \to \infty$ 时有 $D(n, \mathcal{P}_n) = o(1)$ (例如，Kuipers 与 Niederreiter (1974)). 但是对于我们的要求来说，

$o(1)$ 还不够好. 除此而外，"均匀分布"一语在统计中有确切的含义，它不同于现在所说的含义，因此我们建议用术语"均匀散布".

从收敛的观点看，在 $\mathcal{P}_n$ 序贯中改变有限多个集合，$D(n,\mathcal{P}_n)$ 的收敛速度是不变的，例如我们可以在序贯中加入几个偏差大的集合. 但这种做法在实际应用时是不允许的. 我们必需所有 $\mathcal{P}_n$ 保有同样的结构.

例 1.2 命 m 为一个整数 >1 及 $n=m^s$. 我们称集合

$$\mathcal{E}=\left\{\left(\frac{2l_1-1}{2m},\cdots,\frac{2l_s-1}{2m}\right),1\le l_i\le m,\ i=1,\cdots,m\right\} \quad (1.2.8)$$

为**均匀格子点**集合. 我们可以证明

$$c_1(s)n^{-1/s}\le D(n,\mathcal{E})\le c_2(s)n^{-1/s} \quad (1.2.9)$$

(华罗庚于王元 (1981)) 所以按定义 1.3. 当 $s\ge 2$ 时，集合 $\mathcal{E}$ 不是均匀散布的. 这就是为什么对数值计算与统计的许多问题，不推荐使用集合 $\mathcal{E}$ 的原因.

例 1.3 命 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 为 i.i.d. 在 C^s 上均匀分布，及 $\mathcal{P}_n=\{\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$. 则钟开莱 (1949) 与 Kiefer (1961) 证明了

$$D(n,\mathcal{P}_n)=O(n^{-1/2}(\log\log n)^{1/2}) \quad (1.2.10)$$

成立的概率为 1. 这一事实表明用蒙特卡罗方法生成的集合序列 $\mathcal{P}_n$ 在 C^s 上不是均匀散布的概率为 1.

例 1.4 命 $F(x)$ 是一个一元连续的 c.d.f. 及 $F^{-1}(y)$ 为它的逆函数. 则集合

$$Q_F=\left\{F^{-1}\left(\frac{2i-1}{2n}\right),i=1,\cdots,n\right\} \quad (1.2.11)$$

为 $F(x)$ 的大小为 n 且有最小 F- 偏差 $\frac{1}{2n}$ 的代表点.

事实上，命 Q 为 (1.2.4) 定义的集合， $N(x,Q)$ 表示满足 $(2i-1)/2n \le x$ 的点数，及 $N(x,Q_F)$ 表示满足 $F^{-1}((2i-1)/2n) \le x$ 的点数. 则

$$\frac{N(x,Q_F)}{n} - F(x) = \frac{N(F(x),Q)}{n} - F(x)$$

所以

$$\begin{aligned} D_F(n,Q_F) &= \sup_{x\in R}\left|\frac{N(x,Q_F)}{n} - F(x)\right| \\ &= \sup_{y\in[0,1]}\left|\frac{N(y,Q)}{n} - y\right| \\ &= D(n,Q) = 1/2n. \end{aligned}$$

另一方面，若 $\mathcal{P} = \{x_1,\cdots,x_n\}$ 有 F- 偏差 $< \frac{1}{2n}$，则由上述可知 $Q_F = \{F^{-1}(x_1),\cdots,F^{-1}(x_n)\}$ 有偏差 $D(n,Q_F) < \frac{1}{2n}$，这与例 1.1 的结论相矛盾.

例 1.4 的基础是下面的定理：

定理 1.1 假定随机变数 X 有连续 c.d.f. $F(x)$. 则随机变数 $Y = F(X)$ 在 [0, 1] 上是均匀分布的，即 $Y \sim U[0,1]$. 反之，若 $Y \sim U[0,1]$，则 X 有 c.d.f. $F(x)$.

证 对于 $u \in [0,1]$，我们有

$$P(Y \le u) = P(F(x) \le u) = P(X \le F^{-1}(u)) = F(F^{-1}(u)) = u.$$

反之，若 $Y \sim U[0,1]$，则 $P(X \le F^{-1}(u)) = u$，所以 X 的 c.d.f. 为 $F(x)$. 定理证毕.

例 1.5 命 $F(\boldsymbol{x})$ 为一个多元分布及

$$F(x) = \prod_{i=1}^{s} F_i(x_i), \tag{1.2.12}$$

此处 $F_i(x_i), i=1,\cdots,n$ 为一元连续的 c.d.f. 命 $\{\boldsymbol{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{ks}), k=1,\cdots,n\}$ 为 C^s 上有偏差 d 的一个集合，则我们类似地可以证明集合

$$\{x_k=(F^{-1}(c_{k1}),\cdots,F^{-1}(c_{ks})),\ k=1,\cdots,n\} \tag{1.2.13}$$

关于 $F(\boldsymbol{x})$ 有 F- 偏差 d. 证明就留给读者.

最近， Bundschuh 与朱尧辰 (1993) 建议了一个计算低维有限集合偏差的准确算法. 我们的计算程序就是基于他们的方法.

§1.3 C^s 上的数论网格 (NT-net)

Korobov (1959), 华罗庚与王元 (1960, 1964) Halton (1960) 与 Hlawka (1962) 在 1959-1964 年间建议了各种方法以获得 C^s 上有低偏差的点集, 上述结果都已搜集在华罗庚与王元 (1981) 的书中. 本节我们将介绍几个有用的生成 C^s 上均匀散布点集的方法. 这些集合亦称为 C^s 上的数论网格 (NT-net). 一些理论性的结果亦可以在华罗庚与王元 (1981) 与 Niederreiter (1992) 的书中找到.

1.3.1 *glp* 集合

由一个所谓的 **好格子点** (good lattice point) 通过模 n 得到的集合称之为 ***glp* 集合**. 这一集合在实际中最为有用而且便于计算.

定义 1.4 命 $(n;h_1,\cdots,h_s)$ 为一个整矢量满足 $1\le h_i<n$, $h_i\ne h_j\ (i\ne j)$, $s<n$ 及 **最大公约数** $(n,h_i)=1$, $i=1,\cdots,s$. 命

$$\begin{cases} q_{ki}\equiv kh_i \pmod n, \\ x_{ki}=(2q_{ki}-1)/2n, \end{cases} \qquad k=1,\cdots,n, \quad i=1,\cdots,s, \tag{1.3.1}$$

此处我们修改通常的同余乘法使 q_{ki} 满足 $1\le q_{ki}\le n$. 则集合 $\mathcal{P}_n=\{\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks}),\ k=1,\cdots,n\}$ 称为 **生成矢量** $(n;h_1,\cdots,h_s)$ 的 **格子点集**. 如果 $\mathcal{P}_n$ 在所有可能的生成矢量具有最小偏差,

则 $\mathcal{P}_n$ 称为 ***glp* 集合**. 由 (1.3.1) 定义的 x_{ki} 可以由公式

$$x_{ki} = \left\{\frac{2kh_i - 1}{2n}\right\} \tag{1.3.2}$$

来计算.

例 1.6 取 $n = 7$, $s = 3$, $h_1 = 1$, $h_2 = 3$ 及 $h_3 = 6$ 我们有

$$(q_{kj}) = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 6 \\ 2 & 6 & 5 \\ 3 & 2 & 4 \\ 4 & 5 & 3 \\ 5 & 1 & 2 \\ 6 & 4 & 1 \\ 7 & 7 & 7 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{x}_1 = (1/14,\ 5/14,\ 11/14), && \boldsymbol{x}_2 = (3/14,\ 11/14,\ 9/14), \\ &\boldsymbol{x}_3 = (5/14,\ 3/14,\ 7/14), && \boldsymbol{x}_4 = (7/14,\ 9/14,\ 5/14), \\ &\boldsymbol{x}_5 = (9/14,\ 1/14,\ 3/14), && \boldsymbol{x}_6 = (11/14,\ 7/14,\ 1/14), \\ &\boldsymbol{x}_7 = (13/14,\ 13/14,\ 13/14). \end{aligned}$$

此处 $\{\boldsymbol{x}_k, k = 1, \cdots, 7\}$ 为生成矢量 (7; 1, 3, 6) 的格子点集.

给予 $(n; h_1, \cdots, h_s)$ 其在 C^s 上的格子点集通常并不一定是均匀散布的, 例如, 图 1.6 表示不同的 $\{h_i\}$ 对应于相同的 $n = 21$ 的四种分布, 其中图 (a), (b) 是散布得均匀的, 图 (c), (d) 则不然.

Korobov (1959) 与 Hlawka (1962) 独立地指出对于给定的素数 p, 我们可以选取 $\{h_i\}$ 使矢量 $\{p; h_1, \cdots, h_s\}$ 为 C^s 上好的均匀散布点集的生成矢量. 恰切来讲我们有下面的定理:

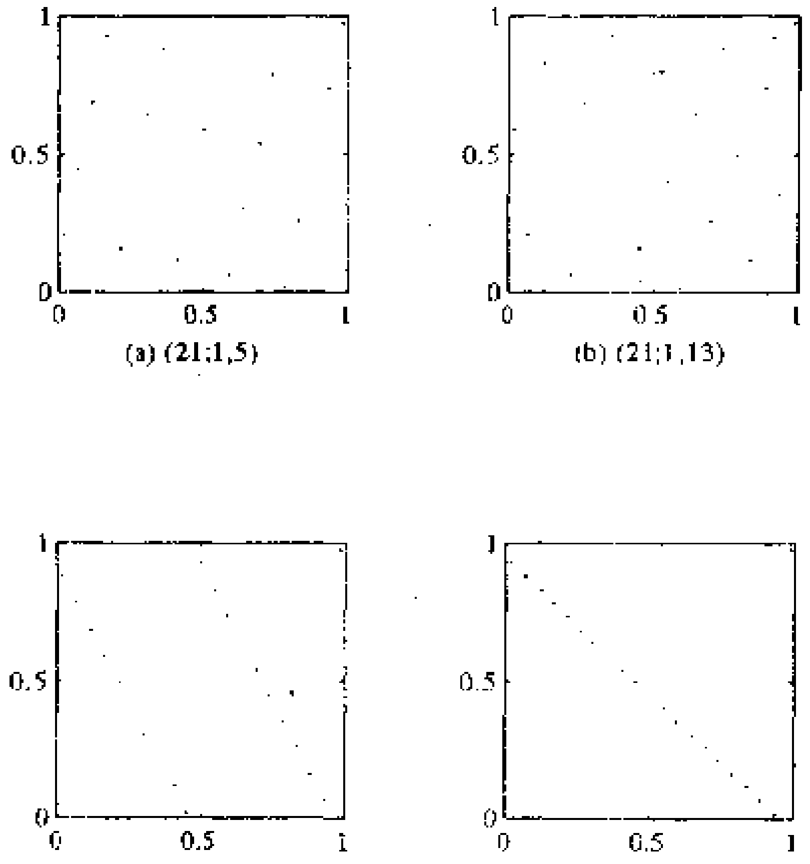
定理 1.2 对于任意素数 p, 皆存在整矢量 $\boldsymbol{h}_p = (h_1, \cdots, h_s)$ 使由 $(p; h_1, \cdots, h_s)$ 生成的格点集有偏差

$$D(p) < c(s)p^{-1}(\log p)^s.$$

关于定理 1.2 的证明可参见华罗庚与王元 (1981) 的书. 我们的主要任务是寻找生成矢量使其对应的格子点集有小偏差. 很多数学家对这个问题作出过贡献 (对于大的 n 的点集有 Korobov (1963), Saltykov (1963), Maisonneuve (1972), Haber (1972), Moon (1974) 及王元, 徐广善与张荣肖 (1978); 对小的 n 的集合有王元与方开泰 (1981) 与 Shaw (1988)). Niederreiter (1978a) 指出定理 1.2 中的素数 p 可以换成任意复合数 n.

将 $(n; h_1, \cdots, h_s)$ 的格点集表示为 $n \times s$ 矩阵

$$\boldsymbol{X} \equiv \boldsymbol{X}(h_1, \cdots, h_s) = (\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n)'.$$



(a) (21;1,5)　(b) (21;1,13)　(c) (21;1,19)　(d) (21;1,20)

图 1.6　各种生成矢量的比较

定义 1.5　两个 $n \times s$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 与 $\boldsymbol{Y}$, 如果它们有相同的偏差, 则称它们等价, 并记之为 $\boldsymbol{X} \stackrel{d}{=} \boldsymbol{Y}$.

我们容易知道下面的性质：

(a) 若 $\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}$ 为 $n\times s$ 的格点集矩阵，则 $\boldsymbol{X}\overset{u}{=}\boldsymbol{Y}$ 的充要条件为存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}:n\times n$ 与 $\boldsymbol{Q}:s\times s$ 使 $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{PXQ}$. 若 $\boldsymbol{P}'\boldsymbol{P}=I$, 且 $\boldsymbol{P}$ 的元素非 0 即 1, 则称方阵 $\boldsymbol{P}$ 为 **置换矩阵**. 在这种情况下 $\boldsymbol{Y}$ 可由 $\boldsymbol{X}$ 的行与列的对换以得到.

(b) 若 $(n,h)=1$, 则 $h(0<h<n)$ 有逆 $h^{-1}\bmod n$, 即 $hh^{-1}\equiv 1\ (\bmod\ n)$, 则有

$$\boldsymbol{X}(h_1,\cdots,h_s)\overset{u}{=}\boldsymbol{X}(1,h_1^{-1}h_2,\cdots,h_1^{-1}h_s)\quad(\bmod n).\qquad(1.3.3)$$

从而在 $(h_1,\cdots,h_s)$ 中我们总可以假定 $h_1=1$.

性质 (b) 将在第五章证明. 在选取好的生成矢量 $(n;h_1^*,\cdots,h_s^*)$ 过程中, 性质 (b) 可以用来节省计算时间. 例如当 $n=p$ 为素数时, 在集合 $\{1,2,\cdots,p-1\}$ 中，$\{h_1,\cdots,h_s\}$ 有 C_{p-1}^s 种取法. 由于我们可以取 $h_1=1$, 所以 $\{1,h_2,\cdots,h_s\}$ 的取法降低至 C_{p-1}^{s-1} 既使这样，当 p 与 s 大时选取一个好的生成矢量 $\{h_1^*,\cdots,h_s^*\}$ 的计算量仍很可观. 于是 Korobov (1959b) 建议取 $(h_1,\cdots,h_s)$ 为下面结构的矢量

$$(h_1,\cdots,h_s)\equiv(1,a,a^2,\cdots,a^{s-1})\ (\bmod p),\qquad(1.3.4)$$

此处 $1<a<p$, 而且他证明了存在一个整数 $a\ (\bmod p)$ 使 $(1,a,\cdots,a^{s-1})\ (\bmod p)$ 对应的格点集仍有偏差 $D(p)\le c(s)p^{-1}(\log p)^s$. Niederveiter (1977) 指出 a 可以在模 p 的 **原根** 中选取，即 a 适合于

$$a^i\not\equiv a^j\ (\bmod p),\quad 1\le i<j<p.$$

例如由于

$$3\equiv 3,3^2\equiv 2,\quad 3^3\equiv 6,\quad 3^4\equiv 4,\quad 3^5\equiv 5,\quad 3^6\equiv 1\ (\bmod 7)$$

及

$$2\equiv 2,2^2\equiv 4,\quad 2^3\equiv 1,\quad 2^4\equiv 2,\quad 2^5\equiv 4,\quad 2^6\equiv 1\ (\bmod 7)$$

所以 3 是模 7 的原根，而 2 不是模 7 的原根. Niederreiter 还证明了，对于素数 p, 皆存在原根 g 使 $(1,g,\cdots,g^{s-1})$ 生成的格点集有偏差

$$D(p)\leq c(s)p^{-1}(\log\ p)^s\log\log p.$$

因为由形如 (1.3.4) 的矢量生成的格点集可以是好的均匀散布点集，所以我们可以在模 p 的原根中找到原根 g 使它对应的格点集有最小的偏差，我们仍称这一集合为 glp 集合. 当 $n=2,4,p^l,2p^l$ 时，此处 p 为一个奇素数及 $l\geq 1$, 我们知道恒存在模 n 之原根，而且我们知道模 n 的原根个数为 $\phi(\phi(n))$, 此处 $\phi(n)$ 为 **Euler ϕ-函数**, 它表示满足于 $1\leq m<n$ 及 $(m,n)=1$ 的整数 m 的个数. 注意 $\phi(\phi(p^l))=p^{l-2}(p-1)\phi(p-1)$ (华罗庚 (1956)). 文献中多数生成矢量均是由这一方法得到的. 当生成矢量 $(n;h_1,\cdots,h_s)$ 由其他方法产生时，则条件 $(n,h_i)=1,i=1,\cdots,s$ 可以不必满足，但如果他们对应的格点集有小偏差，则仍称为 glp 集合. 因 glp 集合便于使用，它有小偏差，且已被算出不少来，所以在实际应用中，我们常常使用 glp 集合. 为使用方便，本书附录 A 中收集了 glp 集合的一些生成矢量.

今后，若 $(h_1,\cdots,h_s)$ 取形式 (1.3.4), 我们就用 $\boldsymbol{X}(a)$ 来代替 $\boldsymbol{X}(h_1,\cdots,h_s)$, 即

$$\boldsymbol{X}(a)=\boldsymbol{X}(h_1,\cdots,h_s). \tag{1.3.5}$$

进而我们有下面的性质：

(c) 给定 n 和 s 则 $\boldsymbol{X}(a)\overset{u}{=}\boldsymbol{X}(a^{-1})\ (\mathrm{mod}\ n)$, 其中 $a^i\not\equiv a^j\ (\mathrm{mod}\ n), 1\leq i<j\leq s-1$.

注记 1.4 命 p 为一个素数. 我们可以证明对于任何 $\varepsilon>0$, 适合于 $1\leq a\leq p$ 且使 $(p;1,a,\cdots,a^{s-1})$ 生成的 glp 集合有偏差

$$D(p)=O(p^{-1}\log^{2s-1}p)$$

的 a 的个数多于 $(1-\varepsilon)p$ (华罗庚与王元 (1981), 定理 3.2 与引理 7.8)). 因此当 p 很大时，我们甚至可以随机地选取 a.

1.3.2 *gp* 集合

由一个所谓 **好点** 得到的集合称为 ***gp* 集**

定义 1.6 命 $\boldsymbol{\gamma}=(\gamma_1,\cdots,\gamma_s)\in C^s$. 若下面形状的集合

$$\{(\{\gamma_1 k\},\cdots,\{\gamma_s k\}),\qquad k=1,2,\cdots\},\tag{1.3.6}$$

的前 n 项构成的点集 $\mathcal{P}_n$ 有偏差

$$D(n,\mathcal{P}_n)\le c(\boldsymbol{\gamma},\varepsilon)n^{-1+\varepsilon},\qquad n=1,2,\cdots$$

则称集合 (1.3.6) 为一个 ***gp* 集**, 而 $\boldsymbol{\gamma}$ 为一个 **好点**.

显然由定义 1.3 可知 $\mathcal{P}_n$ 为 C^s 上的一个 NT-net. 由定义 1.6 可知如果我们有一个好点 $\boldsymbol{\gamma}$, 则 *gp* 集是容易得到的. Baker (1965) 与 Schmidt (1970) 给出了 *gp* 集合的存在性证明. 在实际使用时, 我们推荐下面的好点.

(a) **平方根序列**: 我们取

$$\gamma=(\sqrt{p_1},\cdots,\sqrt{p_s}),\tag{1.3.7}$$

此处 $p_j(1\le j\le s)$ 为互不相同的素数, 例如前 s 个素数.

(b) 命 p 为素数及 $q=p^{1/(s+1)}$. 取

$$\boldsymbol{\gamma}=(q,q^2,\cdots,q^s).\tag{1.3.8}$$

(c) **分圆域方法**. 这一方法是华罗庚与王元 (1964) 建议的:

$$\boldsymbol{\gamma}=\left(\left\{2\cos\frac{2\pi}{p}\right\},\left\{2\cos\frac{4\pi}{p}\right\},\cdots,\left\{2\cos\frac{2\pi s}{p}\right\}\right),\tag{1.3.9}$$

此处 p 为素数 $\ge 2s+3$. 例如对于 $p=7$, 我们有

$$\gamma_1=\left\{2\cos\frac{2\pi}{7}\right\}\simeq 0.2469796037,$$

$$\gamma_2=\left\{2\cos\frac{4\pi}{7}\right\}\simeq 0.5549581321,$$

其对应的 gp 集合为

$$(0.247, 0.555), \quad (0.494, 0.110), \quad (0.741, 0.665), \quad (0.988, 0.220),$$
$$(0.235, 0.775), \quad (0.482, 0.330), \quad (0.729, 0.885), \quad (0.976, 0.440),$$

利用 (1.3.9) 定义的 $\gamma_i(1 \le i \le s)$ 的有理逼近，华罗庚与王元 (1964) 建议了一个获得格点集的方法，他们 1981 的书的附录上的许多生成矢量就是用他们的方法得到的. 这些集合有偏差 $D(n) = O(n^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2(s-1)}+\varepsilon})$.

1.3.3 *H*-集合

Halton (1960) 首先将 C^2 上的 Van der Corput (1935) 点集推广为 $C^s(s > 2)$ 上的点集. 我们称这一集合为 ***H*-集合**. Halton 方法基于自然数的 p **进制表示**.

命 m 为一个自然数 ≥ 2. 则任何自然数 k 均有唯一的 m **进制表示**.

$$\begin{aligned} &k = b_0 + b_1 m + b_2 m^2 + \cdots + b_r m^r, \\ &0 \le b_i \le m-1, \qquad i = 0, 1, \cdots, r, \end{aligned} \tag{1.3.10}$$

此处 $m^r \le k < m^{r+1}$. 对于任何 $c \in (0,1), c$ 皆有唯一的 m 进制表示.

$$c = c_0 m^{-1} + c_1 m^{-2} + \cdots, \quad 0 \le c_i \le m-1, \quad i = 0, 1, 2, \cdots.$$

我们记

$$k = b_r b_{r-1} \cdots b_1 b_0$$

及

$$c = 0.c_0 c_1 \cdots.$$

下面的方法将建立正整数与 (0, 1) 中的有理数之间的一一对应：对于任何有表示 (1.3.10) 的整数 $k \ge 1$, 命

$$y_m(k) = b_0 m^{-1} + b_1 m^{-2} + \cdots + b_r m^{-r-1}. \tag{1.3.11}$$

则 $y_m(k)\in(0,1)$ 称为 k 关于基 m 的根逆. Halton 建议了下面的集合:

命 $p_i(1\le i\le s)$ 为 s 个互不相同的素数, 则

$$x_k=(y_{p_1}(k),\cdots,y_{p_s}(k)),\qquad k=1,2,\cdots \tag{1.3.12}$$

称为 **H-集合**.

Halton 证明了由 (1.3.12) 的前 $n(>\max(p_1,\cdots,p_s))$ 项构成的集合有偏差

$$D(n)\le n^{-1}\prod_{i=1}^{s}\frac{p_i\log(p_in)}{p_i}=O(n^{-1}(\log n)^s). \tag{1.3.13}$$

因此 H- 集合在 C^s 上是好的均匀散布集合.

例 1.7 取 $m=2$. 则 k 的二进位表示及 $y_2(k)(k=1,2,\cdots)$ 如下:

k	b_0	b_1	b_2	b_3	$y_2(k)$
1	1				0.5
2	0	1			0.25
3	1	1			0.75
4	0	0	1		0.125
5	1	0	1		0.625
6	0	1	1		0.375
7	1	1	1		0.875
8	0	0	0	1	0.0625

取 $p_1=2,p_2=3$ 及 $p_3=5$. 则对应的 H- 集合为

(0.5000, 0.3333, 0.2000)　(0.8125, 0.7037, 0.2800)

(0.2500, 0.6667, 0.4000)　(0.1875, 0.1481, 0.4800)

(0.7500, 0.1111, 0.6000)　(0.6875, 0.4815, 0.6800)

(0.1250, 0.4444, 0.8000)　(0.4375, 0.8148, 0.8800)

$$(0.6250, 0.7778, 0.0400) \quad (0.9375, 0.2593, 0.1200)$$

$$(0.3750, 0.2222, 0.2400) \quad (0.0313, 0.5926, 0.3200)$$

$$(0.8750, 0.5556, 0.4400) \quad (0.5313, 0.9259, 0.5200)$$

$$(0.0625, 0.8889, 0.6400) \quad (0.2813, 0.0741, 0.7200)$$

$$(0.5625, 0.0370, 0.8400) \quad (0.7813, 0.4074, 0.9200)$$

$$(0.3125, 0.3704, 0.0800) \quad (0.1563, 0.7407, 0.1600) \cdots$$

因为当 n 与 s 充分大时，(1.3.10) 与 (1.3.11) 的计算量很大，我们可以对于小的素数 $p = 2, 3, \cdots$，算出 $y_p(k)(k = 1, 2, \cdots)$，然后将它们存放在磁盘之中，以便于使用.

利用 H- 集合，我们可以得到偏差比 H- 集合的偏差更小的有限集合. 命 $s \geq 2$ 及 $p_1, \cdots, p_{s-1}$ 为 $s-1$ 个互不相同的素数. 则下面的集合

$$x_k = \left(\frac{2k-1}{2n}, y_{p_1}(k), \cdots, y_{p_{s-1}}(k)\right), \qquad k = 1, 2, \cdots, n$$

称为 **Hammersley 集合** (Hammersley (1960)), 它有偏差

$$D(n) \leq n^{-1} \prod_{i=1}^{s-1} \frac{p_i \log(p_i n)}{\log p_i}. \tag{1.3.14}$$

H- 集合还有几种变体. **攀登的 Halton 集合** 或 **攀登的 H-集合** 为其中的一个. 命 σ 为数组 $(1, 2, \cdots, p)$ 的一个置换. 我们类似于 $y_p(k)$ 定义攀登的根逆 $y_{p,\sigma}(k)$ 如下：

$$y_{p,\sigma}(k) = \sigma_p(b_0)/p + \sigma_p(b_1)/p^2 + \cdots + \sigma_p(b_r)/p^{r+1}, \tag{1.3.15}$$

此处 k 的 p 进制展开为 $k = b_r \cdots b_1 b_0$. 攀登的 Halton 集合定义为

$$\boldsymbol{x}_k = (y_{p_1,\sigma_1}(k), \cdots, y_{p_s,\sigma_s}(k)), \qquad k = 1, 2, \cdots, \tag{1.3.16}$$

此处 σ_i 是 $(1, 2, \cdots, p_i)$, $i = 1, \cdots, s$ 的置换. 如果取 σ_p 为恒等置换, 则得 H- 集合. Braaten 与 Weller (1979) 指出攀登的 H- 集合能够本质地改进 H- 集合的下述性质: 序列 $y_p(k), k = 1, 2, \cdots$ 中含有一个长度为 p 的周期. 我们经常取 $p_1, \cdots, p_s$ 为前 s 个素数, 例如对于 $s = 8$, 则最后两个坐标为 $y_{17}(k)$ 与 $y_{19}(k)$, 它含有两个递增素数 17 与 19. 这导致序列的点的第七与第八个坐标间的强相关性. 对于 $p \leq 53$ 时 Braaten 与 Weller 建议了关于攀登的 H- 集合的一些置换, 他们也指出攀登的 H- 集合的偏差比 H- 集合的偏差为小.

另一种推广 H- 集合的途径为定义 **p-adic加法根逆**:

$$\begin{aligned} x \oplus_p y =& 0.x_1 \cdots x_n \cdots & x \text{ 的正规 } p\text{-adic 展开} \\ & \oplus_p 0.y_1 \cdots y_n \cdots & y \text{ 的正规 } p\text{-addic 展开} \\ =& 0.\overline{x_1 + y_1}^p \cdots \overline{x_n + y_n}^p \cdots \end{aligned}$$

类似于经典加法可以计算 $x \oplus_p y$, 但需从左往右加 (例如 $0.123333 \cdots \oplus_p 0.412777 \cdots = 0.535011 \cdots$). 对于 $p \geq 2, y = \sum_{k \geq 0} y_k / p^{k+1} \in [0,1] \cap Q_p$($Q_p$ 为 p-adic 有理数), 定义

$$\Phi_{p,y}(x) = x \oplus_p y.$$

现在我们来定义 C^s 上的 **Halton型数论网格序列**: 若 $p_1, \cdots, p_s$ 为前 s 个素数, $y_1, \cdots, y_s \in [0,1] \cap Q_p$ 及 $z_1, \cdots, z_s \in [0,1] \cap Q_p$, 则序列

$$\boldsymbol{x}_k = \left(\Phi_{p_1,y_1}^{k-1}(z_1), \cdots, \Phi_{p_s,y_s}^{k-1}(z_s)\right), \qquad k = 1, 2, \cdots$$

的前 n 项构成的集合有偏差 $O(n^{-1}(\log n)^s)$ (Lapeyre and Pagès (1989)).

H- 集合的另一个变体称为 **Faure 序列** (Faure (1982)). 这一集合的偏差比 H- 集合的偏差更小. Niederreiter (1988) 利用 (t, s)

序贯理论定义了一些低偏差序贯. 读者可以在他的书 (Niederreiter (1992)) 中找到详细的讨论.

1.3.4 其他

还有许多 C^s 上的 NT-net 不包括在上面三种方法之中. 例如所谓的 **Haber序列** (Haber (1970)):

$$\boldsymbol{x}_k = \left(\frac{k(k+1)}{2}\sqrt{p_1},\cdots,\frac{k(k+1)}{2}\sqrt{p_s}\right) \pmod 1,$$

此处 $p_1,\cdots,p_s$ 为前 s 个素数. 另一个基于根逆定义的序列是 Sobol (1967) 定义的. 更详细的叙述请见 Sobol (1967) 与 Niederreiter (1988b), 读者可以在华罗庚与王元 (1981), Shaw (1988) 与 Pagès 和 Xiao (1991) 中找到产生 C^s 上 NT-net 的更多的方法.

上述三种主要的集合: *glp* 集合; *gp* 集合及 H- 集合有不少变体及广泛的实际应用 (华罗庚与王元 (1981) 与 Shaw (1988)). *glp* 集合是一个有限集, 而 *gp* 集合与 H- 集合则均为无限集, 每一种集合均各有优缺点, 在实际应用时需按经验来决定选取哪个集合. 为此我们给出如下的评论:

(a) 如果 n 比较小, 则最好用 *glp* 集合. 一般说来, 其他两个集合并不是均匀散布的.

(b) 假定我们先生成一个有 n_1 个点的 NT-net, 然后发现需要追加至 $n_2(>n_1)$ 个点. 若用 *glp* 方法, 由于对于 n_1 与 n_2 的生成矢量是完全不同的, 所以用 *glp* 集合方法必须从头做起. 但如果用 *gp* 集合方法或 H- 集合方法, 则只要生成添加的 (n_2-n_1) 个点即可.

(c) 在这些方法中, H- 集合方法所需的计算量最大. 当 p_i 及 s 较大时, 则集合的点数必须很大才能保证在 C^s 上散布得均匀. 因此 H- 集合只对小的 s 适合.

(d) 当 s 较大例如 $s>10$, 在本书的附录中只含有很少几个 *glp* 的生成矢量, 而当 $s>18$ 时, 则未有生成矢量, 在这种情况下, 我们建议用 *gp* 集合方法, 特别, 由分圆域整底所得的 *gp* 集合.

(e) 当 $s \le 10$ 时，在大部分实际应用中，*glp* 集合都是最好的.

表 1.1　各种方法的比较

n	34	89	144	233	610	1597	2584
gp-1	0.0770	0.0469	0.0249	0.0239	0.0152	0.0048	0.0028
gp-2	0.0693	0.0484	0.0253	0.0180	0.0086	0.0050	0.0037
H–W	0.1853	0.0786	0.0481	0.0350	0.0205	0.0072	0.0053
Haber	0.1644	0.0947	0.0838	0.0604	0.0327	0.0222	0.0217
Halton	0.1106	0.0432	0.0328	0.0207	0.0109	0.0052	0.0030
Hammersley	0.0864	0.0406	0.0251	0.0169	0.0073	0.0031	0.0020
glp	0.0642	0.0276	0.0181	0.0120	0.0050	0.0021	0.0013

表 1.1 给出 7 种 NTM 的比较，其中 *gp*-1 为 $\boldsymbol{\gamma}$ 由 (1.3.7) 定义的 *gp* 集合，而 *gp*-2 为 $\boldsymbol{\gamma}$ 由 (1.3.8) 定义的 *gp* 集合，H–W 为 $\boldsymbol{\gamma}$ 由 (1.3.9) 给出的分圆域方法. 表中给出 $s = 2$ 及不同的 n，由各种方法得出的点集的偏差. 从表中可见在所有情况下，*glp* 集合均是最佳者. 在很多情况下，Hammersley 集合是次佳者而 Haber 集合最差. 在下节，我们将用其他准则对这些方法作更进一步的比较.

§ 1.4　均匀性的其他度量

命 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x}_k, k = 1, \cdots, n\}$ 为 C^s 上的一个点集，已有不少关于集合 $\mathcal{P}$ 在 C^s 上 **均匀性的测度** 方法，在 §1.2 我们已经介绍了其中最重要的一种度量，即偏差. 现在我们来介绍其他的度量.

1.4.1　偏差 D^*

注意对于偏差的定义 (1.2.3) 中，我们只考虑了形为 $[\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\gamma}]$ 的矩形. 当然在偏差的定义中我们可以考虑所有的矩形 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})(\boldsymbol{0} \le \boldsymbol{a} \le \boldsymbol{b} \le \boldsymbol{1} = (1, \cdots, 1))$.

定义 1.7　命 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x}_k\}$ 表示 C^s 上有 n 个点的集合，$\mathcal{K}$ 表示矩形

$$\mathcal{K} = \{[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) : 0 \leq \boldsymbol{a} \leq \boldsymbol{b} \leq \boldsymbol{1}\}. \tag{1.4.1}$$

所成的集合．此外，命 $N([\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}), \mathcal{P})$ 表示 $\mathcal{P}$ 中满足条件 $\boldsymbol{x}_k \in [\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ 的点数．则

$$D^*(n, \mathcal{P}) = D^*(\mathcal{P}) = \sup_{[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) \in \mathcal{K}} \left| \frac{N([\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}), \mathcal{P})}{n} - v([\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})) \right| \tag{1.4.2}$$

称为 $\mathcal{P}$ 的 **星号偏差**. 此处 $v([\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})) = \prod_{i=1}^{s}(b_i - a_i)$ 为 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ 的体积.

下面的定理说明这两种定义本质上是相同的.

定理 1.3

$$D(n) \leq D^*(n) \leq 2^s D(n). \tag{1.4.3}$$

偏差与星号偏差均可以用 **测度论** 的术语来表述．命 v 与 v_n 分别表示 s- 维 **Lebesgue 可测空间** 中由 $F(\boldsymbol{x})$ 与 $F_n(\boldsymbol{x})$ 生成的测度，此处 $F(\boldsymbol{x})$ 为均匀分布 $U(C^s)$ 的 c.d.f. 而 $F_n(\boldsymbol{x})$ 为 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 的经验分布，则

$$D(n, \mathcal{P}) = \sup_{\boldsymbol{\gamma} \in C^s} |v_n(B_{\boldsymbol{\gamma}}) - v(B_{\boldsymbol{\gamma}})|, \tag{1.4.4}$$

此处 $B_{\boldsymbol{\gamma}} = [\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\gamma})$ 及

$$D^*(n, \mathcal{P}) = \sup_{B \in \mathcal{K}} |v_n(B) - v(B)|. \tag{1.4.5}$$

下节我们将把这些表达式推广到更一般的情况.

1.4.2 l_p-偏差

由关系式

$$T_p(n, \mathcal{P}) = \left[\int_{C^s} |v_n(B_{\boldsymbol{\gamma}}) - v(B_{\boldsymbol{\gamma}})|^p \, d\boldsymbol{\gamma} \right]^{1/p} \tag{1.4.6}$$

定义的 $T_p(n,\mathcal{P})$ 是另一个均匀度的度量，它称为 $\boldsymbol{l}_p$-偏差. 当 $p=1,2$ 与 ∞ 时，我们得到 $\boldsymbol{l}_1$-, $\boldsymbol{l}_2$- 与 $\boldsymbol{l}_\infty$-偏差, 后者正好是通常的偏差 $D(n,\mathcal{P})$. Niederrreiter (1978, 971 页) 指出

$$C(s)(D^*(n,\mathcal{P}))^{(s+2)/2} \le T_2(n,\mathcal{P}) \le D(n,\mathcal{P}), \tag{1.4.7}$$

此处 $C(s)>0$ 为一个依赖于 s 的常数, 所以 $D(n), D^*(n)$ 及 $D_2(n,\mathcal{P})$ 在本质上是等价的.

1.4.3 散度

定义 1.8 命 D 为一个有界闭区域及 $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{x}_k\}$ 为 D 上一个含有 n 个点的集合. 则

$$DP(\mathcal{P},D) = \max_{\boldsymbol{x}\in D}\min_{1\le k\le n} d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_k) \tag{1.4.8}$$

称为 $\mathcal{P}$ 在 D 上的 **散度**, 此处 $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_k)$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{x}_k$ 之间的 **欧氏距离**. 若 $D=C^s$, 则我们记 $DP(\mathcal{P},D)=DP(\mathcal{P})$.

点集的散度这个概念是 Niederreiter (1983) 引进并研究的. 这一想法是合理的，对于每一个 $\boldsymbol{x}\in D$, 我们在 $\mathcal{P}$ 中找出一个距 $\boldsymbol{x}$ 最近的点作为 $\boldsymbol{x}$ 的代表. 如果 $\mathcal{P}$ 在 D 上散布得均匀，则 $\boldsymbol{x}$ 与它的代表点之间的距离可以期望较小. 因为需要求出 $\min_{1\le k\le n} d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_k)$ 对所有 $\boldsymbol{x}\in D$ 的最大值，所以散度的计算量很重. 尽管当 s 较小或 $\mathcal{P}$ 在 D 上分布得较规则时，我们可以直接计算 $DP(\mathcal{P},D)$, 但我们往往仍用 NTM 来估计散度.

例 1.8 假定 $D=C^s$ 及 $\mathcal{P}$ 表示例 1.2 所说的均匀格子点集合. 则 $\mathcal{P}$ 的散度等于 s- 维边长为 $(2m)^{-1}$ 的立方体的直径，此处 $n=m^s$, 所以

$$DP(\mathcal{P}) = \frac{\sqrt{s}}{2m} = \frac{\sqrt{s}}{2}n^{-1/s}. \tag{1.4.9}$$

一般说来，散度的准确值很难得到，但它的上，下界估计还是可以求得的. 首先，我们引进下面关于散度的等价定义：

令 $B(\boldsymbol{x},r)$ 表示以 $\boldsymbol{x}$ 为中心，以 r 为半径的 s 维球体. 则

$$DP(\mathcal{P},D)=\min\{r\geq 0:\cup_{1\leq k\leq n}B(\boldsymbol{x}_k,r)\supset D\}. \qquad (1.4.10)$$

这表明散度为最小的值 r, 使以 $\boldsymbol{x}_k(1\leq k\leq n)$ 为中心，以 r 为半径的 n 个球体构成 D 的一个覆盖.

定理 1.4 命 $v(D)$ 表示 D 的体积. 则

$$DP(\mathcal{P},D)\geq\left(\frac{v(D)}{\gamma_s}\right)^{1/s}n^{-1/s}, \qquad (1.4.11)$$

此处 $\gamma_s=\pi^{s/2}/\Gamma(1+s/2)$ 表示 s 维单位球体的体积.

证 命 $r=DP(\mathcal{P},D)$. 则由 (1.4.10) 得

$$\cup_{1\leq k\leq n}B(\boldsymbol{x}_k,r)\supset D$$

所以

$$nr^s\gamma_s\geq v(\cup_{1\leq k\leq n}B(\boldsymbol{x}_k,r))\geq v(D).$$

定理成立. □

下面的定理给出 C^s 上一个集合 $\mathcal{P}$ 的散度与偏差之间的关系，所以由 $D(n,\mathcal{P})$ 的上界估计即诱导出 $DP(\mathcal{P},D)$ 的一个上界估计.

定理 1.5 若 $D=C^s$, 则得

$$DP(\mathcal{P},D)\leq 2\sqrt{s}\,D(n,\mathcal{P})^{1/s}. \qquad (1.4.12)$$

定理 1.5 的证明将在 §3.1 中给出. 特别，由定理 1.5 可知若 $\mathcal{P}$ 在 D 上是好的均匀散布点集，则对于任意 $\varepsilon>0$ 皆有

$$DP(\mathcal{P},D)=O(n^{-1/s+\varepsilon}). \qquad (1.4.13)$$

注意例 1.8 已阐明均匀格子点集合的散度已达到 $O(n^{-1/s})$ 它比 (1.4.13) 的右端为佳. 所以按照散度作度量，则均匀格子点集的散布是很均匀的. 这表示不同的均匀性的度量所导致的结论亦往往不同.

但由于均匀格子点集合的点数为形如 $n = m^s$ 的数，特别当 s 较大，当 m 增加时，n 增长得太快，所以这是一个不利之处，致使该集合在实际中用得很少.

1.4.4 均方差 (MSE)

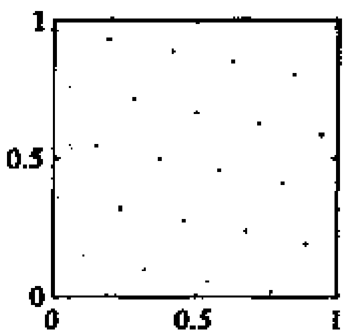
假定 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x}_k, k = 1, \cdots, n\}$ 为 C^s 上的一个集合. 则对于任何 $\boldsymbol{x} \in C^s$, 皆有 $\boldsymbol{x}_{k(\boldsymbol{x})}$ 使

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_{k(\boldsymbol{x})}) = \min_{1 \le j \le n} d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j), \tag{1.4.14}$$

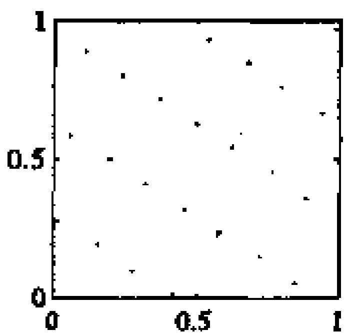
即 $\boldsymbol{x}_{k(\boldsymbol{x})}$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的代表. 我们用 $d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_{k(\boldsymbol{x})})^2$ 在 C^s 上的积分作为 $\mathcal{P}$ 在 C^s 上均匀性的度量，它称为 $\mathcal{P}$ 的 **均方差**:

$$\mathrm{MSE}\,(\mathcal{P}) = \int_{C^s} \min_{1 \le j \le n} d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)^2\, dx. \tag{1.4.15}$$

量 MSE($\mathcal{P}$) 在量化理论中很有用 (§4.4). 用下一章介绍的方法可以来计算 MSE($\mathcal{P}$). 因为在估计偏差时常常略去了低阶项，所以当点集的点数小时，误差较大. 例如当 $s = 2$ 及 $n = 23$ 时，我们选取一个形如 (1.3.4) 的 *glp* 集合，则对于所有可能 $\mathcal{P}$ 来求 MSE($\mathcal{P}$) 的极小，给出 $a = 9$; 而由寻求所有 $\mathcal{P}$ 的偏差的极小，则导致 $a = 7$ (方开泰，王元与袁克海 (1990)). 如果寻求偏差的准确值而不是近似值，则得 $D(23, 7) = 0.0903$ 与 $D(23, 9) = 0.0846$, 这表明关于偏差的渐近公式可能导致大误差. 这两种情况的点集分布见图 1.7.



(a) n=23, a=9



(b) n=23, a=7

图 1.7 两个 *glp* 集合

1.4.5 样本矩

假定 $\{\boldsymbol{y}_k, k=1,\cdots,n\}$ 是 C^s 上均匀分布 $U(C^s)$ 的一个样本. 则样本矩应和总体 $U(C^s)$ 对应的矩很接近. 命 $\{\boldsymbol{c}_k, k=1,\cdots,n\}$ 为 C^s 上的一个 NT-net, 因由 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 生成的经验分布函数接近于 $U(C^s)$ 的 c.d.f. (§1.2), 所以由 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 定义的样本矩应该接近于 $U(C^s)$ 对应的矩.

为简单计, 我们考虑情况 $s=1$. 分布 $U(0,1)$ 的关于原点的 r 阶矩等于

$$\mu_r = \frac{1}{r+1}, \qquad r=1,2,\cdots, \tag{1.4.16}$$

而 $\{c_k\}$ 关于原点的 r 阶样本矩为

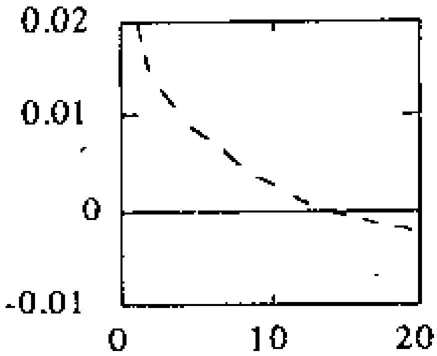
$$m_r = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} c_j^r, \qquad r=1,2,\cdots. \tag{1.4.17}$$

由例 1.1 可知 $\{c_k = \frac{2k-1}{2n}, k=1,\cdots,n\}$ 为 $[0,1]$ 上有最小偏差的点集, 所以

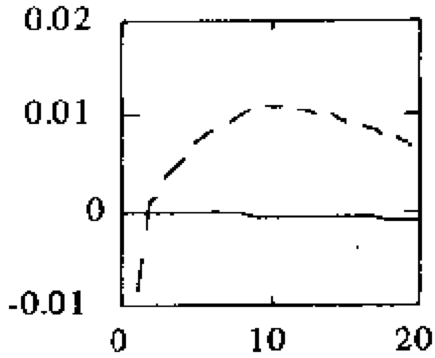
$$m_r = \frac{1}{n^{r+1}}\sum_{k=1}^{n}(k-0.5)^r, \qquad r=1,2,\cdots.$$

命 $\{x_i, i=1,\cdots,n\}$ 是 $U(0,1)$ 的一个随机样本, 我们用 v_r 表示 $\{x_i\}$ 的 r 阶样本矩. 图 1.8 给出当 $n=30,100$ 时 $\{m_r\}$ 与 $\{v_r\}$ 的比较, 其中虚线表示 $v_r-\mu_r$ 而实线则表示 $m_r-\mu_r$. 图形表示 m_r 远比 v_r 更接近 μ_r, 所以由 NTM 得到的集合比随机数得到的集合优越.

在表 1.2 中, 我们给出当 $s=3$ 及各种 n 时, 列于表 1.1 中诸方法的比较. 若 $\boldsymbol{x}\sim U(C^3)$, 则当 $i\neq j$ 及 $1\leq i,j\leq 3$ 时, 混合矩 $E(X_iX_j)=1/4=0.25$. 表中的数据表示七种方法的 $E(X_iX_j)$ 的样本矩与 0.25 的差的绝对值之和. 由表 1.2 可见, 从样本矩的观点看, *glp* 集合总是最佳的.



(a) n=100



(b) n=30

图 1.8 样本矩

表 1.2 各种方法的比较

n	35	135	266	597	1626	2440
gp-1	0.0062	0.0156	0.0077	0.0020	0.0014	0.0015
gp-2	0.0386	0.0255	0.0262	0.0178	0.0013	0.0037
H-W	0.0619	0.0119	0.0073	0.0024	0.0015	0.0013
Haber	0.0706	0.0318	0.0171	0.0120	0.0073	0.0084
Haiton	0.0815	0.0254	0.0168	0.0086	0.0034	0.0024
Hammersley	0.0305	0.0116	0.0074	0.0053	0.0034	0.0012
glp	0.0094	0.0183	0.0126	0.0054	0.0011	0.0011

§ 1.5 球体、球面与单纯形上的数论网格

在前几节，我们已经介绍了寻找 C^s 上 NT–nets 的方法. 现在我们要求在一些特殊的区域，如球体，球面，单纯形等上均匀散布的 NT–nets. 这是一个更为困难的问题. 例如，我们要在单位圆内:

$$B_2 = \{(x, y) : x^2 + y^2 \leq 1\}, \tag{1.5.1}$$

找到一个有 n 个点的均匀散布集合，若用极坐标

$$\begin{aligned} x &= r\cos(2\pi\theta), \\ y &= r\sin(2\pi\theta), \end{aligned} \tag{1.5.2}$$

此处 $(r,\theta)\in C^2$, 在 C^2 上取一个 NT-net $\mathcal{P}_n=\{(r_k,\theta_k),k=1,\cdots,n\}$. 并将 $\mathcal{P}_n$ 代入 (1.5.2), 即得 B_2 上 n 个点

$$\begin{aligned} x_k &= r_k\cos(2\pi\theta_k),\\ y_k &= r_k\sin(2\pi\theta_k), \end{aligned}\qquad k=1,\cdots,n, \tag{1.5.3}$$

显然这些点在 B_2 上不是均匀散布的 (图 1.9 (a)) 而且大部分点均集中在 B_2 的中心附近.

现在我们来解释出现这种现象的理由. 假定 (X,Y) 是 B_2 上均匀分布的随机矢量. 则由 (1.5.2) 定义的 (r,θ) 亦是随机矢量, 可以证明 r 与 θ 是独立的, 且分别有 p.d.f. 如下:

$$\begin{aligned} p_r(x) &= 2x, \qquad 0\le x\le 1,\\ p_\theta(x) &= 1, \qquad 0\le x\le 1, \end{aligned}$$

及 c.d.f. 如下:

$$\begin{aligned} F_r(x) &= x^2, \qquad 0\le x\le 1,\\ F_\theta(x) &= 1, \qquad 0\le x\le 1, \end{aligned}$$

(r,θ) 在 C^2 上不是均匀分布的, 所以点集 (1.5.3) 在 B_2 上不是均匀散布的. 由蒙特卡罗方法生成连续分布的随机数方法的启发, 我们不用 $\{(r_k,\theta_k)\}$, 而用 $\{(F_r^{-1}(r_k),F_\theta^{-1}(\theta_k))\}=\{(\sqrt{r_k},\theta_k)\}$ 代入 (1.5.3) 则得

$$\begin{aligned} x_k &= \sqrt{r_k}\cos(2\pi\theta_k),\\ y_k &= \sqrt{r_k}\sin(2\pi\theta_k), \end{aligned}\qquad k=1,\cdots,n. \tag{1.5.4}$$

由图 1.9 (b) 可知点集 (1.5.4) 是散布得很均匀的.

为什么集合 $\mathcal{P}_F=\{(x_k,y_k)\}$ 在 B_2 上均匀散布? 假定 $\mathcal{P}=\{(r_k,\theta_k)\}$ 在 C^2 上有一个低偏差 d, 则易证 $\{(\sqrt{r_k},\theta_k)\}$ 关于 $F(x,y)=F_r(x)F_\theta(y)$ 有一个 F- 偏差 d (例 1.5).

给定 $(x,y)\in B_2$, 有一个 $(q,\phi)\in C^2$ 使

$$x=\sqrt{q}\cos(2\pi\phi),\qquad y=\sqrt{q}\sin(2\pi\phi).$$

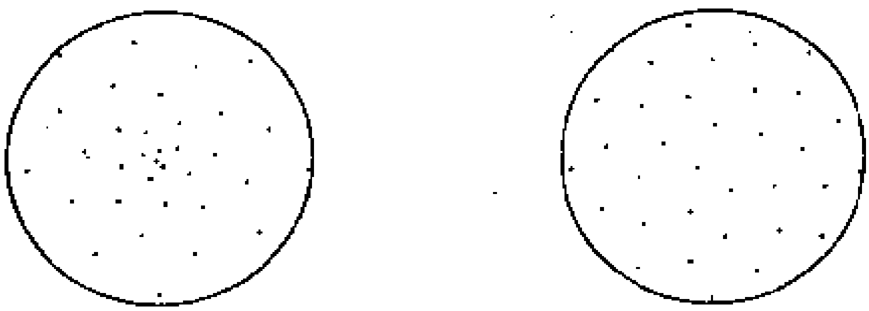
我们用 $N((r,\theta),\mathcal{P})$ 表示 $\mathcal{P}$ 落在矩形 $[0,r]\times[0,\theta]$ 中的点数，它等 $\mathcal{P}_F$ 落在扇形区域

$$\begin{aligned}G=\{(x,y):x=\tilde{q}\cos(2\pi\phi),y=\tilde{q}\sin(2\pi\phi),\\ 0\le\tilde{q}\le\sqrt{r},0\le\phi\le\theta\}.\end{aligned}\tag{1.5.5}$$

中的点数. 矩形 $[0,r]\times[0,\theta]$ 与扇形区域 G 的面积各为 $r\theta$ 与 $\pi r\theta$ (图 1.10), 所以

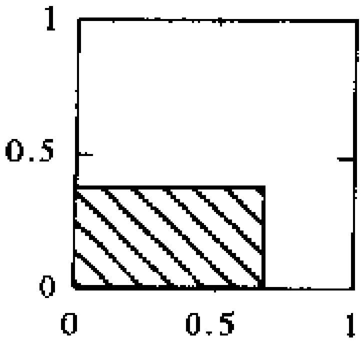
$$\begin{aligned}\left|\frac{N((r,\theta),\mathcal{P})}{n}-r\theta\right|&=\left|\frac{N(G,\mathcal{P}_F)}{n}-\frac{v(G)}{u(B_2)}\right|\\&=\left|\frac{N(G,\mathcal{P}_F)}{n}-\frac{\pi r\theta}{\pi}\right|,\end{aligned}\tag{1.5.6}$$

此处 $N(G,\mathcal{P}_F)$ 表示落于 G 中的 $\mathcal{P}_F$ 的点数. 如果我们在 F- 偏差的定义中用扇形区域来代替矩形，则公式 (1.5.6) 给出 $\mathcal{P}_F$ 在 B_2 上均匀性的度量. 所以我们需推广 F- 偏差的概念

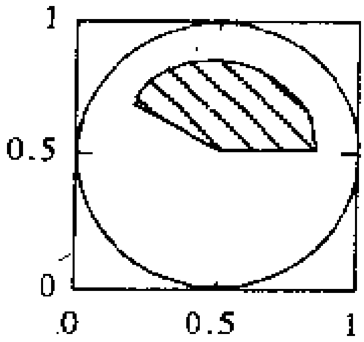


(a)　　　　(b)

图 1.9　B_2 上的两个点集



(a)



(b)

图 1.10 C^2 上的点映射至 B_2 的说明

定义 1.9 命 $\boldsymbol{x} \in R^s$ 为一个有 c.d.f. $F(\boldsymbol{x})$ 的随机矢量，它有随机表示 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{\tau})$，此处 $\boldsymbol{\tau} \sim U(C^t)$，$t \le s$. 命 $\{\mathbf{c}_k,\ k = 1, \cdots, n\}$ 为 C^t 上有偏差 d 的一个 NT-net. 则我们称集合 $\mathcal{P}_F = \{\boldsymbol{h}(\mathbf{c}_k), k = 1, \cdots, n\}$ 关于 $F(\boldsymbol{x})$ 有 **伪 $\boldsymbol{F}$-偏差** d.

对于实际应用，下面的表述是有用的. 命 $\boldsymbol{x}$ 是一个 s- 维随机矢量，它有 **随机表示式**

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi}), \tag{1.5.7}$$

此处 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_t)$ 是一个有独立分量的 t- 维随机矢量. 分别记 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{\phi}$ 的 c.d.f. 为 $F(\boldsymbol{x})$ 与 $G(\boldsymbol{\phi})$. 命 $\{\boldsymbol{y}_k,\ k = 1, \cdots, n\}$ 为 R^t 上关于 G 有 F- 偏差 d 的点集. 则集合

$$\mathcal{P}_F = \{\boldsymbol{x}(\boldsymbol{y}_k),\ k = 1, \cdots, n\} \tag{1.5.8}$$

关于 F 有伪 F–偏差 d.

当 $\boldsymbol{x} \sim U(D)$ 时，此处 D 是 R^s 中的一个有界闭区域，而 $U(D)$ 为 **$\boldsymbol{D}$ 上的均匀分布**，我们将阐明伪 F- 偏差给出 D 上均匀性的一个合理的度量. $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 由

$$p(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1/v(D), & 若\ \boldsymbol{x} \in D, \\ 0, & 若\ \boldsymbol{x} \notin D, \end{cases}$$

给出．由附录 B 可知，对应于 $\phi_1,\cdots,\phi_t$ 的联合密度为

$$\begin{cases} \dfrac{1}{v(D)}J(\boldsymbol{\phi}), & 若 \boldsymbol{\phi}\in C^t, \\ 0, & 其余 \end{cases}$$

此处

$$J(\boldsymbol{\phi})=\det(\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}')^{1/2} \quad 及 \quad T=\left(\frac{\partial x_j}{\partial \phi_i}\right).$$

由假定可知

$$\frac{1}{v(D)}J(\phi)=\prod_1^t p_i(\phi_i),$$

此处 ϕ_i 的 p.d.f. 为 $p_i(\phi_i)$. 所以

$$\frac{1}{v(D)}\int_{\phi\le r} J(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}=\prod_1^t F_i(r_i),$$

此处 F_i 是 ϕ_i 的 c.d.f. 及 $\boldsymbol{r}=(r_1,\cdots,r_t)$.

在 C^t 上给定一个偏差为 d 的集合 $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{c}_k,k=1,\cdots,n\}$, 则由定义 1.9 可知集合 $\mathcal{P}_F=\{\boldsymbol{x}_k,k=1,\cdots,n\}$ 有伪 F- 偏差 d, 此处

$$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}(F_1^{-1}(c_{k1}),\cdots,F_t^{-1}(c_{kt})), \qquad k=1,\cdots,n, \tag{1.5.9}$$

对于每个 $\boldsymbol{r}\in C^t$, 命

$$G_{\boldsymbol{r}}=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi}),\boldsymbol{\phi}\le\boldsymbol{r}\} \tag{1.5.10}$$

为一个区域．易见当 $\boldsymbol{x}\sim U(D)$ 时

$$P(\boldsymbol{x}\in G_{\boldsymbol{r}})=v(G_r)/v(D),$$

命 $N(\mathcal{P}_F,G_{\boldsymbol{r}})$ 表示落在 $G_{\boldsymbol{r}}$ 中的 $\boldsymbol{x}_k$ 的个数．则

$$GD(\mathcal{P}_F,D)=\sup_{\boldsymbol{r}\in C^t}\left|\frac{N(\mathcal{P}_F,G_{\boldsymbol{r}})}{n}-\frac{v(G_{\boldsymbol{r}})}{v(D)}\right| \tag{1.5.11}$$

给出 D 上 $\mathcal{P}_F$ 的均匀性的度量. 我们将证明 $GD(\mathcal{P}_F, D)$ 就是伪 F- 偏差. 易见如果 $\boldsymbol{c}_k$ 落于矩形 $R_{\boldsymbol{r}} = \{\boldsymbol{\phi} : \boldsymbol{0} \le \boldsymbol{\phi} \le \boldsymbol{r}\}$, 则 $\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{c}_k)$ 落在 $G_{\boldsymbol{r}}$ 中. 所以 $N(\mathcal{P},\boldsymbol{r}) = N(\mathcal{P}_F, G_{\boldsymbol{r}})$, 此处 $N(\mathcal{P},\boldsymbol{r})$ 表示 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 落在 $R_{\boldsymbol{r}}$ 中的点数, 及

$$\left|\frac{N(\mathcal{P}_F, G_{\boldsymbol{r}})}{n} - \frac{v(G_{\boldsymbol{r}})}{v(D)}\right| = \left|\frac{N(\mathcal{P},\boldsymbol{r})}{n} - \frac{v(G_{\boldsymbol{r}})}{v(D)}\right| = \left|\frac{N(\mathcal{P},\boldsymbol{r})}{n} - \prod_1^t F_i(r_i)\right|,$$

此处最后一步由

$$v(G_{\boldsymbol{r}}) = \int_{\boldsymbol{\phi}<\boldsymbol{r}} J(\boldsymbol{\phi})\, d\boldsymbol{\phi} = v(D)\prod_{i=1}^t F_i(r_i).$$

给出. 因此

$$GD(\mathcal{P}_F, D) = \sup_{\boldsymbol{r}\in C^t}\left|\frac{N(\mathcal{P}_F, G_{\boldsymbol{r}})}{n} - \prod_{i=1}^t F_i(r_i)\right| = \sup_{\boldsymbol{r}\in C^t}\left|\frac{N(\mathcal{P}_F, G_{\boldsymbol{r}})}{n} - F(\boldsymbol{r})\right|,$$

此处 $F(\boldsymbol{r}) = \prod_{i=1}^t F_i(r_i)$, 右端正是关于 $F(\boldsymbol{r})$ 的 F- 偏差, 它等于 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{c}_k\}$ 的偏差.

总结上面论述得下面的定理:

定理 1.6 命 D 为 R^s 上的一个有界闭区域及 $\boldsymbol{x} \sim U(D)$. 假定 $\boldsymbol{x}$ 有一个随机表示 (1.5.7), 此处 $\boldsymbol{\phi}$ 是一个 t 维随机矢量, 具有独立边缘的 p.d.f. $p_i(\phi_i)$ 与 c.d.f. $F_i(\phi_i), 1 \le i \le t$. 命 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{c}_k\}$ 为 C^t 上一个有偏差 d 的集合. 则由 (1.5.8) 定义的集合 $\mathcal{P}_F$ 有伪 F- 偏差 d, 它等于由 (1.5.11) 定义的 $GD(\mathcal{P}_F, D)$.

定理 1.6 给出的产生 D 上 NT-net 的方法称为 **逆变换法**. 将这个方法用于一些特殊区域 D, 我们可以找到 D 上均匀散布的点集, 即 **D 上的 NT-net**. 特别我们考虑下面的区域:

$$A_s = \{(x_1, \cdots, x_s) : 0 \le x_1 \le \cdots \le x_s \le 1\}, \tag{1.5.12}$$

$$B_s = \{(x_1, \cdots, x_s) : x_1^2 + \cdots + x_s^2 \le 1\}, \tag{1.5.13}$$

$$U_s = \{(x_1, \cdots, x_s) : x_1^2 + \cdots + x_s^2 = 1\}, \tag{1.5.14}$$

$$V_s = \{(x_1, \cdots, x_s) \in R_+^s : x_1 + \cdots + x_s \le 1\}, \tag{1.5.15}$$

$$T_s = \{(x_1, \cdots, x_s) \in R_+^s : x_1 + \cdots + x_s = 1\}. \tag{1.5.16}$$

此处

$$R_+^s = \{(x_1, \cdots, x_s) : x_i \ge 0, \ i = 1, \cdots, s\} \tag{1.5.17}$$

为 R_s 的正部分.

1.5.1 A_s 上的 NT-net

命 $\boldsymbol{x} = (X_1, \cdots, X_s)$ 为在 $\boldsymbol{A_s}$ 上均匀分布的随机矢量. 命

$$\begin{cases} X_1 = \phi_1\phi_2\cdots\phi_s, \\ X_2 = \phi_2\phi_3\cdots\phi_s, \\ \quad \cdots \\ X_{s-1} = \phi_{s-1}\phi_s, \\ X_s = \phi_s, \end{cases} \tag{1.5.18}$$

此处 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_s) \in C^s$. 这一变换将 C^s 映射至 A_s. 我们在附录 B.1 中将证明:

(a) $\phi_1, \cdots, \phi_s$ 是相互独立的.

(b) ϕ_j 有 p.d.f. $j\phi^{j-1}$ 及 c.d.f.

$$F_j(\phi) = \phi^j, \qquad j = 1, \cdots, s, \tag{1.5.19}$$

此处 $0 \le \phi \le 1$. $F_j(\phi)$ 的逆函数为

$$F_j^{-1}(\phi) = \phi^{1/j}.$$

假定 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 是 C^s 上的一个 NT-net, 则 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 是 A_s 上的 NT-net, 此处 $\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks})$ 其中

$$\begin{cases} x_{k1}=c_{k1}c_{k2}^{1/2}\cdots c_{ks}^{1/s}, \\ x_{k2}=c_{k2}^{1/2}\cdots c_{ks}^{1/s}, \\ \qquad\cdots \\ x_{ks}=c_{ks}^{1/s}, \end{cases} \qquad k=1,2,\cdots,n. \tag{1.5.20}$$

我们建议读者做一下本章的习题 1.12 以便了解集合 (1.5.20) 的散布.

1.5.2 B_s 上的 NT-net

命 $\boldsymbol{x}$ 为在单位球体 $\boldsymbol{B_s}$ 上均匀分布的随机矢量, 考虑**球坐标变换 (SCT)**

$$\begin{aligned} X_j &= \phi_1 S_2\cdots S_j C_{j+1}, \qquad j=1,\cdots,s-1 \\ X_s &= \phi_1 S_2\cdots S_{s-1}S_s, \end{aligned} \tag{1.5.21}$$

此处

$$\begin{aligned} S_i &= \sin(\pi\phi_i), \quad C_i=\cos(\pi\phi_i), \qquad i=1,\cdots,s-1, \\ S_s &= \sin(2\pi\phi_s), \quad C_s=\cos(2\pi\phi_s), \end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{\phi}=(\phi_1,\cdots,\phi_s)\in C^s$. 这个变换将 C^s 映到 B_s. 由附录 B.2 可知

(a) $\phi_1,\cdots,\phi_s$ 是相互独立的.

(b) ϕ_j 有 p.d.f.

$$p_j(\phi)=\begin{cases} s\phi^{s-1}, & \text{若 } j=1, \\ \dfrac{\pi(\sin(\pi\phi))^{s-j}}{B\left(\dfrac{1}{2},\dfrac{s-j+1}{2}\right)}, & \text{若 } j=2,\cdots,s, \end{cases}$$

此处 $B(a,b)$ 表示贝塔 (beta) 函数. 特别有 $p_s(\phi)=1$, 这表示 ϕ_s 在 $[0,1]$ 上是均匀分布. ϕ_j 的 c.d.f. 为

$$F_j(\phi)=\begin{cases}\phi^s, & 若\ j=1,\\ \dfrac{\pi}{B\left(\dfrac{1}{2},\dfrac{s-j+1}{2}\right)}\int_0^{\phi}(\sin\pi x)^{s-j}\,dx, & 若\ j=2,\cdots,s.\end{cases} \tag{1.5.22}$$

由于当 $j(>1)$ 较小时, 上面积分的解析表达式有许多项, 所以很难找到 $F_j(\phi)$ 的逆函数的简单表达式.

由逆变换法, 我们可以得到 B_s 上均匀散布的集合: 命 $\{c_k\}$ 为 C^s 上的一个 NT-net. 计算

$$\begin{aligned} b_{k1}&=c_{k1}^{1/s},\\ b_{ki}&=F_i^{-1}(c_{ki}), \qquad k=1,\cdots,n, \quad i=2,\cdots,s, \end{aligned} \tag{1.5.23}$$

此处 $\{b_{ki}\}$ 可以由数值积分来确定 (Yamauti (1972)). 命

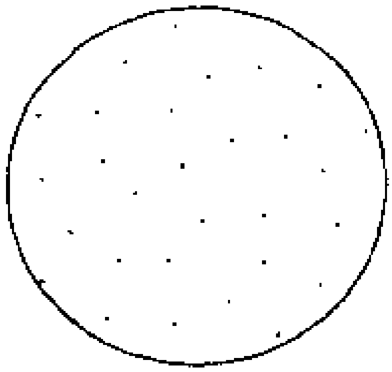
$$\begin{aligned} x_{kj}&=b_{k1}\prod_{i=2}^{j}S_{ki}C_{k,j+1}, \qquad j=1,\cdots,s-1,\\ x_{ks}&=b_{k1}\prod_{i=2}^{s}S_{ki}, \end{aligned} \tag{1.5.24}$$

此处

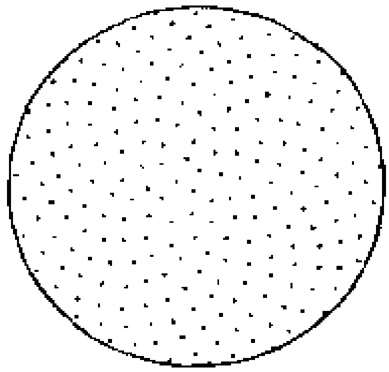
$$\begin{aligned} S_{ki}&=\sin(\pi b_{ki}), \quad C_{ki}=\cos(\pi b_{ki}), \qquad i=2,\cdots,s-1,\\ S_{ks}&=\sin(\pi b_{ks}), \quad C_{ks}=\cos(\pi b_{ks}), \qquad k=1,\cdots,n, \end{aligned}$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks}),k=1,\cdots,n\}$ 是 B_s 上的一个 NT-net.

图 1.11 为由 (31; 1, 12) 与 (233; 1, 144) 生成的 *glp* 集合所得到的这种集合 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 的分布图, 看来两个集合在 B_2 上是均匀散布的.



(a)



(b)

图 1.11　B_2 上两个 NT-net

例 1.9　我们经常遇到这样的问题, 它需要我们给出一个 B_3 上的 NT-net. 由 (1.5.22) 可知 $\phi_i(i=1,2,3)$ 的 c.d.f. 为

$$\begin{aligned} F_1(\phi) &= \phi^3, \\ F_2(\phi) &= \frac{1}{2}(1-\cos(\pi\phi)), \\ F_3(\phi) &= \phi. \end{aligned} \tag{1.5.25}$$

若 $\{\mathbf{c}_k = (c_{k1}, c_{k2}, c_{k3}), k=1,\cdots,n\}$ 为 C^3 上的一个 NT-net, 则由 (1.5.23) 与 (1.5.25) 可知

$$b_{k1} = c_{k1}^{1/3}, \qquad b_{k2} = \frac{1}{\pi}\arccos(1-2c_{k2}), \qquad b_{k3} = c_{k3}.$$

所以由 (1.5.24) 得

$$\begin{aligned} x_{k1} &= c_{k1}^{1/3}\cos\left(\pi\frac{1}{\pi}\arccos(1-2c_{k2})\right) \\ &= c_{k1}^{1/3}(1-2c_{k2}), \\ x_{k2} &= b_{k1}\sin(\pi b_{k2})\cos(2\pi b_{k3}) \\ &= 2\sqrt{c_{k2}(1-c_{k2})}\,c_{k1}^{1/3}\cos(2\pi c_{k3}), \\ x_{k3} &= b_{k1}\sin(\pi b_{k2})\sin(2\pi b_{k3}) \\ &= 2\sqrt{c_{k2}(1-c_{k2})}\,c_{k1}^{1/3}\sin(2\pi c_{k3}), \end{aligned} \tag{1.5.26}$$

集合 $\{\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},x_{k2},x_{k3}),k=1,\cdots,n\}$ 是 B_3 上的 NT-net.

1.5.3 U_s 上的 NT-net

命 $\boldsymbol{x}$ 为在单位球面 $\boldsymbol{U_s}$ **上均匀分布** 的随机矢量. 我们用球坐标变换

$$
\begin{aligned}
X_j &= \prod_{i=1}^{j-1} S_i C_j, \qquad j=1,\cdots,s-1,\\
X_s &= \prod_{i=1}^{s-1} S_i,
\end{aligned} \tag{1.5.27}
$$

此处

$$
\begin{aligned}
S_i &= \sin(\pi\phi_i), \qquad C_i=\cos(\pi\phi_i), \quad i=1,\cdots,s-2,\\
S_{s-1} &= \sin(2\pi\phi_{s-1}), \qquad C_{s-1}=\cos(2\pi\phi_{s-1}).
\end{aligned}
$$

这个变换将 C^{s-1} 映射至 U_s. 由附录 B.2 可知

(a) $\phi_1,\cdots,\phi_{s-1}$ 是相互独立的.

(b) 当 $j=1,\cdots,s-1$ 时, ϕ_j 的 p.d.f. 与 c.d.f. 分别是

$$
p_j(\phi)=\frac{\pi}{B\left(\dfrac{1}{2},\dfrac{s-j}{2}\right)}(\sin(\pi\phi))^{s-j-1}
$$

与

$$
F_j(\phi)=\int_0^{\phi} p_j(t)\,dt,
$$

则类似在 B_s 上寻求 NT-net 的算法, 我们可得 U_s 上的 NT-net.

当 $s=2$ 时, $[0,1]$ 上只有一个均匀分布的随机变数 ϕ_1, 它具有 c.d.f. $F_1(\phi)=\phi$. 由例 1.1 可知 $Q=\{(2k-1)/2n,k=1,\cdots,n\}$ 为 $[0,1]$ 上有最小偏差的点集, 所以集合

$$
\begin{aligned}
x_{k1} &= \cos(2\pi(2k-1)/(2n)),\\
x_{k2} &= \sin(2\pi(2k-1)/(2n)),
\end{aligned} \qquad k=1,\cdots,n,
$$

在单位圆周上均匀散布．这和我们的直观是一致的．

当 $s=3$ 时，有两个独立的随机变数 ϕ_1 与 ϕ_2，它们分别有 c.d.f.

$$F_1(\phi)=\frac{1}{2}(1-\cos\pi\phi)$$

与

$$F_2(\phi)=\phi,$$

若 $\{(c_{k1},c_{k2},k=1,\cdots,n\}$ 是 C^2 上的一个 NT-net, 则集合 $\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},x_{k2},x_{k3}),k=1,\cdots,n\}$ 是 U_3 上的一个 NT-net, 此处

$$\begin{aligned}
x_{k1}&=1-2c_{k1},\\
x_{k2}&=2\sqrt{c_{k1}(1-c_{k1})}\cos(2\pi c_{k2}), \qquad k=1,\cdots,n.\\
x_{k3}&=2\sqrt{c_{k1}(1-c_{k1})}\sin(2\pi c_{k2}),
\end{aligned} \tag{1.5.28}$$

这一方法不同于 Marsaglia (1972) 由蒙特卡罗方法得到的结果．在 §4.3, 我们将给出另一个更好的产生 B_s 与 U_s 上的 NT-net 的方法．

1.5.4 V_s 上的 NT-net

命 $\boldsymbol{x}$ 为在单位 l_1- 球体 $\boldsymbol{V_s}$ 上均匀分布的随机矢量．命

$$\begin{aligned}
X_i&=\phi_1\prod_{j=2}^{i}S_j^2C_{i+1}^2, \qquad i=1,\cdots,s-1,\\
X_s&=\phi_1\prod_{j=2}^{s}S_j^2,
\end{aligned} \tag{1.5.29}$$

其中

$$S_i=\sin(\pi\phi_i/2), \quad C_i=\cos(\pi\phi_i/2), \qquad i=2,\cdots,s. \tag{1.5.30}$$

这一变换将 C^s 映射至 V_s. 由附录 B.3 可知

(a) $\phi_1,\cdots,\phi_s$ 是相互独立的．

(b) ϕ_j 的 p.d.f. 与 c.d.f. 分别是

$$p_j(\phi)=\begin{cases} s\phi^{s-1}, & 若 j=1,\\ \pi(s-j+1)\left(\sin\left(\frac{\pi\phi}{2}\right)\right)^{2s-2j+1}\cos\left(\frac{\pi\phi}{2}\right), \\ \qquad 若\ j=2,\cdots,s \end{cases}$$

与

$$F_j(\phi)=\begin{cases} \phi^s, & 若\ j=1,\\ \left(\sin\left(\frac{\pi\phi}{2}\right)\right)^{2(s-j+1)}, & 若\ j=2,\cdots,s. \end{cases}$$

命 $\{\mathbf{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{ks}),k=1,\cdots,n\}$ 为 C^s 上的一个 NT-net 及

$$b_{kj}=F_j^{-1}(c_{kj}),\qquad j=1,\cdots,s,\quad k=1,\cdots,n.$$

则 $\{\mathbf{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks}),k=1,\cdots,n\}$ 是 V_s 上的一个 NT-net，其中

$$x_{ki}=F_1^{-1}(c_{k1})\prod_{j=2}^{i-1}\left(\sin\left(\frac{\pi b_{kj}}{2}\right)\right)^2\left(\cos\left(\frac{\pi b_{k,i+1}}{2}\right)\right)^2,$$
$$i=1,\cdots,s-1,$$
$$x_{ks}=F_1^{-1}(c_{k1})\prod_{j=2}^{s}\left(\sin\left(\frac{\pi b_{kj}}{2}\right)\right)^2.$$

由于

$$b_{kj}=\frac{2}{\pi}\arcsin\left(c_{kj}^{\frac{1}{2(s-j+1)}}\right),\qquad j=2,\cdots,s,$$

所以

$$\left.\begin{aligned}\sin^2\left(\frac{\pi b_{kj}}{2}\right)&=c_{kj}^{\frac{1}{s-j+1}},\\ \cos^2\left(\frac{\pi b_{kj}}{2}\right)&=1-c_{kj}^{\frac{1}{s-j+1}},\end{aligned}\right\}\qquad j=2,\cdots,s,$$

因此 x_{kj} 有简单的表达：

$$
\begin{aligned}
x_{ki} &= c_{k1}^{1/s}\prod_{j=2}^{i} c_{kj}^{\frac{1}{s-j+1}}\left(1-c_{k,i+1}^{\frac{1}{s-i}}\right), && i=1,\cdots,s-1,\\
x_{ks} &= c_{k1}^{1/s}\prod_{j=2}^{s} c_{kj}^{\frac{1}{s-j+1}}, && k=1,\cdots,n.
\end{aligned}
\tag{1.5.31}
$$

当 $s=2$ 时，我们有

$$
\begin{aligned}
x_{k1} &= \sqrt{c_{k1}}\,(1-c_{k2}),\\
x_{k2} &= \sqrt{c_{k1}}\,c_{k2},
\end{aligned}
\qquad k=1,\cdots,n.
$$

1.5.5 T_s 上的 NT-net

命 $\boldsymbol{x}$ 为单纯形 $\boldsymbol{T_s}$ **上均匀分布**的随机矢量. 命

$$
\begin{aligned}
X_i &= \prod_{j=1}^{i-1} S_j^2 C_i^2, \qquad i=1,\cdots,s-1,\\
X_s &= \prod_{j=1}^{s-1} S_j^2.
\end{aligned}
\tag{1.5.32}
$$

其中

$$
S_i=\sin\left(\frac{\pi\phi_i}{2}\right),\qquad C_i=\cos\left(\frac{\pi\phi_i}{2}\right),\qquad i=1,\cdots,s-1.
$$

这一变换将 C^{s-1} 映射至 T_s. 由附录 B.3 可知

(a) $\phi_1,\cdots,\phi_{s-1}$ 为相互独立的.

(b) 当 $j=1,2,\cdots,s-1$ 时 ϕ_j 的 c.d.f. 为

$$
F_j(\phi)=\left(\sin\left(\frac{\pi\phi}{2}\right)\right)^{2(s-j)}.
$$

命 $\{\mathbf{c}_k, k=1,\cdots,n\}$ 为 C^{s-1} 上的一个 NT-net. 则类似于

V_s, 我们知道 $\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$ 为 T_s 上的一个 NT-net, 此处

$$
\begin{aligned}
x_{ki} &= \prod_{j=1}^{i-1} c_{kj}^{\frac{1}{s-j}}\left(1-c_{ki}^{\frac{1}{s-i}}\right), \qquad i=1,2,\cdots,s-1,\\
x_{ks} &= \prod_{j=1}^{s-1} c_{kj}^{\frac{1}{s-j}}, \qquad k=1,\cdots,n.
\end{aligned} \tag{1.5.33}
$$

1.5.6 有界闭区域上的 NT-net

命 D 为一个 R^s 上的 s 维有界闭区域，如果 D 有一个参数表示 (1.5.7) 且适合上面所述条件，则可以用逆变换法寻求在 D 上均匀散布的点集. 如果 D 不适合上述要求，则我们建议下面的程序：命 $D\subset[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$. 假定 $\{\boldsymbol{c}_k, k=1,\cdots,n\}$ 在 C^s 上均匀散布，定义

$$
b_{kj}=a_j+(b_j-a_j)c_{kj}, \qquad j=1,\cdots,s, \quad k=1,\cdots,n. \tag{1.5.34}
$$

则 $\{\boldsymbol{b}_k=(b_{k1},\cdots,b_{ks}), k=1,\cdots,n\}$ 在 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 上均匀散布. 命 $\mathcal{P}_m=\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,m\}$ 为 $\{\boldsymbol{b}_k\}$ 中落于 D 中的点集. 则 $\mathcal{P}_m$ 显然在 D 上均匀散布 (图 1.12). 在实际应用的大部分情况中，这一方法既简单又有效，但当 D 的维数低于 s 时，需作一些变化才能运用这一方法. 当 D 有一个参数表示 (1.5.7) 时，恰如 A_s, B_s 与 U_s 等，则逆变换法比这一方法为佳.

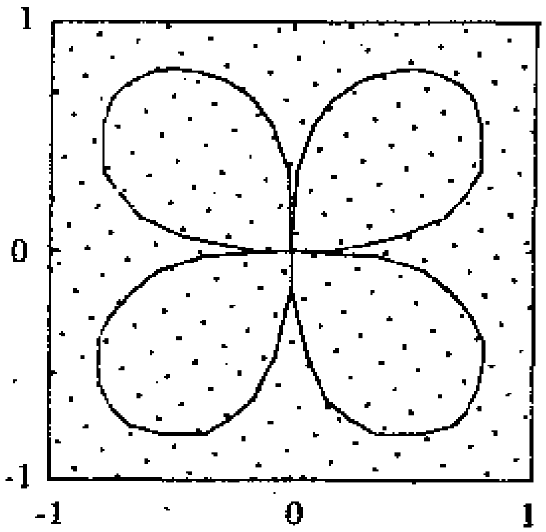


图 1.12　D 上的一个 NT-net

§1.6 其它方法

命 $\boldsymbol{x} \sim U(D)$, 此处 D 是一个 s 维区域, $F_1(x)$ 是 X_1 的 c.d.f., 给定 $X_j = x_j$, $j = 1, \cdots, i-1$; $i = 2, \cdots, s$, X_i 的条件 c.d.f. 为 $F(x_i \mid x_1, \cdots, x_{i-1})$. 置

$$\begin{cases} Y_1 = F_1(X_1), \\ Y_i = F_i(X_i \mid X_1, \cdots, X_{i-1}), \quad i = 2, \cdots, s. \end{cases} \tag{1.6.1}$$

这称为 Rosenblatt 变数 (Rosenblatt (1952)). 用类似于定理 1.1 的证法可以证明, 每一个 Y_i 有一个不依赖于 $Y_1, \cdots, Y_{i-1}$ 的均匀分布 $U(0,1)$, 所以 $Y_1, \cdots, Y_s$ 为 i.i.d. $U(0,1)$. 显然变换 $(X_1, \cdots, X_s) \to (Y_1, \cdots, Y_s)$ 是一一变换, 并将 D 映射为 C^s. $(X_1, \cdots, X_s) \to (Y_1, \cdots, Y_s)$ 的雅可比就是 $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f.

张润楚 (1991) 用 Rosenblatt 变换去寻找 A_s, B_s, U_s, V_s 与 T_s 上的对应变换. 其结果与王元与方开泰 (1990a) 建议的并已在 §1.5 中阐述的方法所得的结果是本质上相同的.

注意: 逆变换法中的表示不是唯一的. 在逆变换法中我们假定 $\boldsymbol{x}$ 在 D 上均匀分布而且可以表示为

$$\boldsymbol{x} = f(\boldsymbol{z}), \qquad \boldsymbol{z} \in C^t, \qquad t \leq s,$$

此处 $\boldsymbol{z} = (Z_1, \cdots, Z_t)$ 有相互独立的分量, 它们的 c.d.f. 分别为 $F_j, j = 1, \cdots, t$. 命

$$\boldsymbol{F}^{-1} = (F_1^{-1}, \cdots, F_t^{-1}).$$

则由定理 1.1 可知 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{z})$ 在 C^t 上均匀分布, 而且

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{F}^{-1}(\boldsymbol{y})).$$

因 $\boldsymbol{x}$ 的随机表示不是唯一的, 我们可以由不同的表示得到许多不同的集合. 让我们看看下面两个例子.

例 1.10 命 m 为适合 $s \le 2m \le s+1$ 的整数，并假定随机矢量 $\boldsymbol{y}$ 在 C^{2m} 上均匀分布．置

$$\begin{aligned} Z_{2i-1} &= \sqrt{-2\log Y_{2i-1}}\cos(2\pi Y_{2i}), \\ & \qquad\qquad\qquad\qquad i=1,\cdots,m. \\ Z_{2i} &= \sqrt{-2\log Y_{2i-1}}\sin(2\pi Y_{2i}), \end{aligned} \tag{1.6.2}$$

这称为 **Box-Muller 变换** (BMT) (Rubinstein (1981))．我们可以证明

$$\boldsymbol{z} = (Z_1,\cdots,Z_s) \sim N_s(0, I_s),$$

其中 $N_s(\boldsymbol{0}, I_s)$ 表示 s- 维标准正态分布．由下面的 (2.2.23) 可知

$$\boldsymbol{x} = \frac{\boldsymbol{z}}{\sqrt{\boldsymbol{z}'\boldsymbol{z}}} \tag{1.6.3}$$

在 U_s 上均匀分布．由 (1.6.2) 与 (1.6.3) 可知 $\boldsymbol{x}$ 可以表为 $\boldsymbol{y}$ 的函数．记 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})$．则我们可以用逆变换法找到一个在 U_s 上均匀散布的集合．这个算法是 Sibuya (1962) 与 Shaw (1988) 建议的，但这比 §1.5 给出的方法差些．粗略地说，以前的方法仅需一个 $(s-1)$- 维的点集，而后面方法当 s 为偶数时，需要一个 s- 维点集，当 s 为奇数时，需要一个 $(s+1)$- 维点集．因 U_s 的维数是 $s-1$，所以由一个高维的点集来诱导出一个低维的点集是不经济的．前面方法给出的点集的均匀性亦比后者好些．

让我们用样本矩来比较球坐标变换法 (称为方法 I) 及 BMT 法 (称为方法 II) (§1.4)．表 1.3 与 1.4 给出由这两个方法求出的样本矩的比较，此处 $n^{(l)}$ 表示方法 l 中用的集合的点数，而 $M_{ijk}^{(l)}$ 则表示用方法 l 得到的 $E(X_iX_jX_k)$ 的样本矩．例如 $M_{22}^{(1)}$ 表示方法 I 得到的 $E(X_2X_2) = E(X_2^2)$ 的样本矩．这两张表的结果说明在绝大多数情况下，方法 I 都比方法 II 为优，特别当 s 为奇数时，更是这样．在 §4.3 中，我们将给出更多的讨论．

表 1.3 两个方法的比较 (s =3, $n^{(1)}$ = 377, $n^{(2)}$ =440)

$M_1^{(1)} = -0.00001$	$M_2^{(1)} = 0.00002$	$M_3^{(1)} = 0.00004$
$M_1^{(2)} = -0.00181$	$M_2^{(2)} = 0.00363$	$M_3^{(2)} = -0.00720$
	$EX_i = 0$	
$M_{11}^{(1)} = 0.33332$	$M_{22}^{(1)} = 0.33332$	$M_{33}^{(1)} = 0.33334$
$M_{11}^{(2)} = 0.33718$	$M_{22}^{(2)} = 0.33956$	$M_{33}^{(2)} = 0.32324$
	$EX_i^2 = 1/3$	
$M_{111}^{(1)} = -0.00001$	$M_{222}^{(1)} = -0.00000$	$M_{333}^{(1)} = -0.00000$
$M_{111}^{(2)} = -0.00118$	$M_{222}^{(2)} = 0.00054$	$M_{333}^{(2)} = -0.00649$
	$EX_i^3 = 0$	
$M_{1111}^{(1)} = 0.19999$	$M_{2222}^{(1)} = 0.20000$	$M_{3333}^{(1)} = 0.20000$
$M_{1111}^{(2)} = 0.20176$	$M_{2222}^{(2)} = 0.20595$	$M_{3333}^{(2)} = 0.19088$
	$EX_i^4 = 1/5$	

表 1.4 两个方法的比较 ($s = 4, n^{(1)} = n^{(2)} = 307$)

$M_1^{(1)} = -0.00001$	$M_2^{(1)} = 0.00223$	$M_3^{(1)} = 0.00026$	$M_4^{(1)} = 0.00030$
$M_1^{(2)} = -0.00104$	$M_2^{(2)} = 0.00405$	$M_3^{(2)} = 0.00109$	$M_4^{(2)} = 0.00269$
		$EX_i = 0$	
$M_{11}^{(1)} = 0.24997$	$M_{22}^{(1)} = 0.24977$	$M_{33}^{(1)} = 0.25015$	$M_{44}^{(1)} = 0.25008$
$M_{11}^{(2)} = 0.25024$	$M_{22}^{(2)} = 0.24993$	$M_{33}^{(2)} = 0.24994$	$M_{44}^{(2)} = 0.24987$
		$EX_i^2 = 1/4$	
$M_{111}^{(1)} = -0.00001$	$M_{222}^{(1)} = 0.00224$	$M_{333}^{(1)} = -0.00002$	$M_{444}^{(1)} = 0.00003$
$M_{111}^{(2)} = -0.00026$	$M_{222}^{(2)} = 0.000473$	$M_{333}^{(2)} = -0.00142$	$M_{444}^{(1)} = 0.00612$
		$EX_i^3 = 0$	
$M_{1111}^{(1)} = 0.12495$	$M_{2222}^{(1)} = 0.12481$	$M_{3333}^{(1)} = 0.12507$	$M_{4444}^{(1)} = 0.12507$
$M_{1111}^{(2)} = 0.12356$	$M_{2222}^{(2)} = 0.12673$	$M_{3333}^{(2)} = 0.12458$	$M_{4444}^{(1)} = 0.12576$
		$EX_i^4 = 1/8$	

例 1.11 假定 $\boldsymbol{y}=(Y_1,\cdots,Y_s)$ 在 C^s 上均匀分布，即 $Y_1,\cdots,Y_s$ i.i.d. 及 $Y_i\sim U(0,1)$. 我们已知 $F(x)=1-e^{-x}$ 是标准指数分布的 c.d.f. 所以 $F^{-1}(Y_1),\cdots,F^{-1}(Y_s)$ 为 i.i.d. 且每个都遵守指数分布. 命

$$\boldsymbol{z}=(Z_1,\cdots,Z_s)=(F^{-1}(Y_1),\cdots,F^{-1}(Y_s)),$$

则

$$\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)=\frac{\boldsymbol{z}}{\|\boldsymbol{z}\|}\sim U(T_s), \tag{1.6.4}$$

此处 $\|\boldsymbol{z}\|=Z_1+\cdots+Z_s$ 为 $\boldsymbol{z}$ 的 l_1- 模 (方开泰, Kotz 与吴启宏 (1990), 113 页). 由于 Y_i 与 $1-Y_i$ 有同样的分布 $U(0,1)$ 与

$$X_i\overset{\mathrm{d}}{=}\frac{\log Y_i}{\sum\limits_{j=1}^{s}\log Y_j},\qquad i=1,\cdots,s, \tag{1.6.5}$$

此处 $\overset{\mathrm{d}}{=}$ 表示等号两端有同样的分布，我们可以得到在 T_s 上均匀散布的点集. 命 $\{\boldsymbol{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{ks}),\ k=1,\cdots,n\}$ 为 C^s 上的一个 NT–net 及

$$x_{ki}=\frac{\log c_{ki}}{\sum\limits_{j=1}^{s}\log c_{kj}},\qquad i=1,\cdots,s,\quad k=1,\cdots,n. \tag{1.6.6}$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks}),k=1,\cdots,n\}$ 为 T_s 上的 NT–net.

因 T_s 的维数是 $s-1$, 用这个方法，一个 $(s-1)$- 维的点集是由一个 s- 维的点集诱导出来的. 这一方法得到的集合的均匀度应比 §1.5 所述的方法为差.

习题

1.1 求出下列 5 个点： (0.12, 0.05), (0.25, 0.34), (0.44, 0.86), (0.67, 0.12), (0.89, 0.95) 的偏差.

1.2 求出由生成矢量 $(31,1,12)$ 生成的 glp 集合及 C^2 上一个 31 个点的随机数集合. 然后由这两个集合的图象来比较它们的均匀度.

1.3 找出例 1.6 给出的 glp 集合的偏差.

1.4 试证由 $(5;1,2)$ 与 $(5;1,3)$ 生成的 glp 集合有同样的偏差 (提示: $2\cdot 3\equiv 1 \pmod 5$).

1.5 命 $\beta_1=1.5,\beta_2=1.75$ 及 $\beta_3=2$. 给出由例 1.7 定义的 gp 集合的前 $n=100$ 点.

1.6 用分圆域方法 ((1.3.9)) 给出对于 $s=20$ 及 $n=15$ 的 gp 集合点列.

1.7 对于 $p_1=11,p_2=13$, 给出 H- 集合的前 $n=10$ 项, 并给出它们的点图

1.8 命 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\cdots,\alpha_s)$, 此处 α_i 为互异的无理数. 命 $\boldsymbol{x}_k=k\boldsymbol{\alpha} \pmod{\mathbf{1}}$, $k=1,2,\cdots$, 此处 $\mathbf{1}=(1,\cdots,1)$. 则当 $\boldsymbol{\alpha}$ 选取适当时, $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 为 C^s 上均匀散布的无穷集合或甚至是 C^s 上好的均匀散布点集. 我们建议下面两种选取 $\boldsymbol{\alpha}$ 的方法:

(a) 置 $\boldsymbol{\alpha}=(\sqrt{p_1},\cdots,\sqrt{p_s})$, 此处诸 p_i 为互异的素数.

(b) 置 $\alpha=(p^{\frac{1}{s+1}},\cdots,p^{\frac{s}{s+1}})$, 此处 p 为素数. 对于 $s=4$, 生成由上面两个方法给出的集合.

1.9 命 $\boldsymbol{x}_k=(\frac{k(k+1)}{2}\sqrt{p_1},\cdots,\frac{k(k+1)}{2}\sqrt{p_s}) \pmod{\mathbf{1}}, k=1,2,\cdots$, 此处诸 p_i 为互异的素数. 则 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 称为 **Haber 集** (§1.3.4). 证明 Haber 集合是习题 1.8(a) 给出的集合的子集, 并给出当 $s=2,n=50$ 及 $s=4,n=50$ 时的 Haber 集合.

1.10 命 F_n 由 $F_0=0,F_1=1.F_{n+1}=F_n+F_{n-1}(n\ge 1)$ 来定义. 则 $\{F_n\}$ 称为 **Fibonacci 序列**. 我们可以证明由 $(F_m;1,F_{m-1})$ 生成的 glp 集合为有偏差 $O(F_m^{-1}\log F_m)(m\ge 3)$ 的好的均匀散布点集. 试对于 $n=34$, 给出由 Fibonacci 序列来生成 glp 集合 (提示: $F_9=34$).

1.11 Fibonacci 序列可以作如下推广: 命 $a_1,\cdots,a_s$ 为 s 个正整数, 及命 $F_i=a_i(i=1,\cdots,s)$, 与 $F_m=F_{m-1}+\cdots+$

$F_{m-s}(m=s+1,s+2,\cdots)$. 则称 $\{F_m\}$ 为**广义 Fibonacci 序列**. 我们得到一个由 $(F_m;1,F_{m-1},\cdots,F_{m-s+1})$ 生成的 s-维 *glp* 集合. 试对于 $s=3$ 生成 *glp* 集合

1.12 试用生成矢量 (31; 1, 14) 与 (144; 1, 89) 在 A_2 上生成两个 NT-nets. 并给出它们的点图.

1.13 试用生成矢量 (31; 1, 14) 与 (144; 1, 89) 在 B_2 与 U_3 上生成四个 NT-nets.

1.14 用习题 1.13 同样的生成矢量在 T_3 上生成两个 NT-nets.

1.15 命 $\boldsymbol{A}$ 为实系数 $s\times s$ 正定方阵及 $E_s=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\le 1\}$ 为 R^s 上的椭球体. 又命 $ED_s=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=1\}$ 为 E_s 的表面. 找出 $v(E_s)$ 与 $v(ED_s)$ 以及 E_s 与 ED_s 上的 NT-nets. (提示: 存在一个方阵 $\boldsymbol{T}$ 使 $\boldsymbol{T}'\boldsymbol{T}=\boldsymbol{A}$).

1.16 命 $\boldsymbol{X}$ 在 $D=\{(x,y): y\le \sin x, 0\le x\le \pi\}$ 上均匀散布. 找出一个在 D 上生成 NT-net 的途径.

1.17 给出计算 (1.5.33) 中 $\{x_{ki}\}$ 的递推公式 (§4.3).

第二章　统计中多重积分的近似计算

命 D 为一个 R^s 上的有界闭区域，$f(\boldsymbol{x})$ 为一个在 D 上定义的函数．我们希望计算定积分

$$I(f) = \int_D f(x)\,dv,$$

此处 dv 表示 D 的体积元素．对经常用到的区域 D，例如矩形，球体，球面与单纯形等，本章将给出 $I(f)$ 的求积公式，然后利用这些公式来求各种多元连续分布的概率与矩．为了完整起见，我们将对各种多元分布作一扼要介绍，其中包括椭球对称分布，多元 Liouville 分布及可加若吉斯蒂克椭球分布．

§ 2.1　矩形上数值积分的数论方法

首先命 D 为 C^s 及 $f(\boldsymbol{x})$ 在 C^s 上定义．考虑积分

$$I(f) = \int_{C^s} f(x)\,dx. \tag{2.1.1}$$

注意被积函数需要属于某一函数类，例如连续函数类，有界变差函数类或可微函数类等．因多元统计中经常出现正态分布，所以关于正态分布的概率与矩的计算有不少有效的方法．这些方法可能比本节介绍的方法更有效．但是，本节所介绍的方法不仅可以用于多元正态分布，而且可以用到绝大多数多元连续分布．今后，各种方法的比较是基于被积函数属于某特定的函数类．下面介绍近似计算积分 (2.1.1) 的几种途径．

2.1.1　经典方法

我们将重积分 (2.1.1) 化为 $[0, 1]$ 上单重积分的累次积分，即

$$I(f)=\int_0^1 dx_1\int_0^1 dx_2\cdots\int_0^1 f(x_1,\cdots,x_s)\,dx_s, \tag{2.1.2}$$

然后运用单重积分的求积公式来逐次应用于 (2.1.2) 的每一个单重积分上，例如用单重积分的 Simpson 公式．如果对于每个单重积分用 m 个点，则用来近似计算 (2.1.2) 的总点数为 $n=m^s$．当 s 大时， n 增加得很快．如果微商 $\partial^s f/\partial x_1\cdots\partial x_s$ 在 C^s 上连续，则这一方法的收敛速度仅为 $O(n^{-1/s})$ 或在条件 $\frac{\partial^{2s}}{\partial x_1^2\cdots\partial x_s^2}$ 连续下，用 Simpson 公式可得误差 $O(n^{-2/s})$ (华罗庚与王元 (1981))．所以这一方法几乎是无用的．

2.1.2 蒙特卡罗方法

40 年代兴起的另一构造求积公式的方法是 S.Ulam 与 J. von Neumann 的蒙特卡罗方法的一部分．蒙特卡罗方法的基本思想是将一个分析问题转化为一个有同样解答的概率问题，然后用统计模拟来研究后一问题．典型的方法是下面的所谓 **样本均值蒙特卡罗方法** (或 **样本均值方法**)．

假定 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)$ 为在 C^s 上均匀分布的随机矢量．则 $f(\boldsymbol{x})$ 为一个随机变数，其期望与标准离差分别为

$$E(f(\boldsymbol{x}))=\int_{C^s} f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}=I(f)$$

与

$$\sigma(f)\equiv\sigma(f(\boldsymbol{x}))=\left(\int_{C^s} f(\boldsymbol{x})^2\,d\boldsymbol{x}-E(f(\boldsymbol{x}))^2\right)^{1/2}.$$

如果我们取 $\boldsymbol{x}$ 的 n 个独立样本 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$，则 $I(f)$ 的 **无偏估计** 就是它的样本均值

$$I(f,n)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(\boldsymbol{x}_i). \tag{2.1.3}$$

由强大数律，当 $n\to\infty$ 时 $I(f,n)$ 以概率为 1 地收敛到 $I(f)$．由中心极限定理，当 n 大时， $I(f,n)$ 是近似正态分布的，所以我们可以得到，例如

$$|I(f,n)-I(f)|\le 1.96\sigma(f)n^{-1/2} \tag{2.1.4}$$

成立的概率约为 0.95. 尽管当 $s > 4$ 时, (2.1.4) 中的误差项 $O(n^{-1/2})$ 比 $O(n^{-2/s})$ 好得多, 但 (2.1.4) 中的误差是概率意义的而不是普通的绝对误差. 由重对数律可以证明

$$\lim_{n\to\infty}\sup\sqrt{\frac{n}{2\ln(\ln n)}}\left|\frac{1}{n}\sum_{1}^{n}f(\boldsymbol{x}_i)-I(f)\right|=\sigma^2(f)$$

成立的概率为 1, 所以蒙特卡罗方法的收敛速度在任何情况下可以说不低于 $O\left(\sqrt{\ln(\ln(n))/n}\right)$.

2.1.3 数论方法

多重积分近似计算的数论方法基于 Weyl (§1.2 §1.5) 意义下的均匀分布理论 (注意, 在国内的数论界文献中用术语 "一致分布").

命 $\mathcal{P}_n=\{\mathbf{c}_k^{(n)},k=1,\cdots,n\}$ 为 C^s 上的一个点集. 如果它是 C^s 上的一个 NT-net, 即它有低偏差. 则我们可以用

$$I(f,\mathcal{P}_n)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}f(\mathbf{c}_k^{(n)}) \tag{2.1.5}$$

来近似逼近 $I(f)$, 并称之为 **NT-均值方法**. 那么 NTM 的误差估计是什么呢? 要回答这个问题, 我们要引进 Hardy 与 Krause 意义之下, 函数的 **有界变差** 概念 (华罗庚与王元 (1981)). 为简单起见, 我们叙述 $s=2$ 的情况. 对于任何正整数 l,m 及 C^2 的一个分割

$$\sigma:\left\{\begin{array}{l}0=x_0<x_1<\cdots<x_l=1,\\ 0=y_0<y_1<\cdots<y_m=1.\end{array}\right.$$

命

$$\Delta_{10}f(x_i,y)=f(x_{i+1},y)-f(x_i,y),$$

$$\Delta_{01}f(x,y_j)=f(x,y_{j+1})-f(x,y_j),$$

及

$$\begin{aligned}\Delta_{11} f(x_i, y_j) =& f(x_{i+1}, y_{j+1}) - f(x_{i+1}, y_j) \\ & - f(x_i, y_{j+1}) + f(x_i, y_j) \\ =& \Delta_{10}\Delta_{01} f(x_i, y_j),\end{aligned}$$

此处 $f(x,y)$ 为 C^2 上定义的函数. 则

$$V_\sigma = \sum_{i=0}^{l-1}\sum_{j=0}^{m-1} |\Delta_{11} f(x_i, y_j)| + \sum_{i=0}^{l-1} |\Delta_{10} f(x_i, 1)| + \sum_{j=0}^{m-1} |\Delta_{01} f(1, y_j)|$$

称为 $f(x,y)$ 关于 σ 的变差. 如果 $V(f) \equiv \sup_\sigma V_\sigma < \infty$, 则 $f(x,y)$ 称为在 Hardy 与 Krause 意义下的 **有界变差函数**, 而 $V(f)$ 称为 f 在 C^2 上的 **全变差**. 这一概念容易推广至任何维数 $s(>2)$ (华罗庚与王元 (1981)). 这函数类的定义过于技术性又难于掌握, 特别当 s 大时更是如此. 一个较为易掌握, 差不多是相同的函数类, 它由在测度意义下的有限变差函数构成, 用起来就方便多了. 这一函数类由 Bouleau (1990) 定义, 而由 Pagès 与 Xiao (1991) 所发展.

定理 2.1 假定 $\mathcal{P}_n$ 为 C^s 上的点集且有偏差 $D(n)$ 及 $f(\boldsymbol{x})$ 为 C^s 上在 Hardy 与 Krause 意义下有全变差 $V(f)$ 的有界变差函数. 则

$$|I(f) - I(f, \mathcal{P}_n)| \le V(f) D(n). \tag{2.1.6}$$

当 $s=1$ 时, Koksma 证明了这一定理. Hlawka 将这一结果推广至 $s>1$ 的情况 (华罗庚与王元 (1981), 第五章).

假定导数

$$\frac{\partial^s f}{\partial x_1 \cdots \partial x_s} \tag{2.1.7}$$

存在, 且其各低阶导数皆在 C^s 上均囿于 L. 则我们可以证明

$$V(f) \le 2^s L,$$

所以

$$|I(f)-I(f,\mathcal{P}_n)|\le 2^s LD(n), \tag{2.1.8}$$

由于 L 比较易于估计，所以 (2.1.8) 在实际计算中是有用的.

由定理 2.1 可知当 $n\to\infty$ 时， $I(f,\mathcal{P}_n)\to I(f)$. 而且收敛速度为 $D(n)$. 我们可以找到一个 $\mathcal{P}_n$ 使 $D(n)=O(n^{-1+\epsilon})$, 甚至 $D(n)=O(n^{-1}(\log n)^s)$. 当 $s>2$ 时，这些结果比数值积分中的样本均值蒙特卡罗方法的误差 $O(n^{-1/2})$ 好多了. 进而言之， $\mathcal{P}_n$ 的表达式并不复杂而且便于在计算机上产生. 所以相比于经典方法与蒙特卡罗方法，数值积分中的 NTM 有较大的优越性.

实际上，当被积函数足够光滑时，收敛速度 $O(n^{-1}(\log n)^s)$ 还可以进一步改进. 例如收敛速度达到 $O(n^{-\alpha}(\log n)^{\alpha s})(\alpha>1)$ 的求积公式是存在的 (华罗庚与王元 (1981), 朱尧辰 (1990), Pagès 与 Xiao (1991)).

我们先看一个简单例子. 假定随机矢量 $\boldsymbol{x}\sim N_3(\mathbf{0},\boldsymbol{I}_3)$, 此处 $N_3(\mathbf{0},I_3)$ 为 R^3 中的标准**正态分布**. 我们欲求 $\boldsymbol{x}$ 在 C^3 上的概率，即

$$\begin{aligned}p&=\int_0^1\int_0^1\int_0^1(2\pi)^{-3/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x_1^2+x_2^2+x_3^2)\right\}dx_1dx_2dx_3\\&=\int_{C^3}f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x},\end{aligned}$$

实际上，$p=[\Phi(1)-\Phi(0)]^3\cong 0.039772181953$, 此处 $\Phi(x)$ 为 $N(0,1)$ 的 c.d.f. 假定 $\{\boldsymbol{x}_k,k=1,\cdots,n\}$ 为 C^3 上的一个点集及我们用

$$\hat{p}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}f(\boldsymbol{x}_k)$$

来计算 p. 我们取下面三种点集： 1) 均匀格子点： $\{\frac{2i-1}{2m},\frac{2j-1}{2m},\frac{2q-1}{2m}: i,j,k=1,\cdots,m\}$; 2) 由蒙特卡罗方法生成的 C^3 上的随机数； 3) *glp* 集合 (§1.3). 由于 1) 中点的个数取形式 $n=m^3$, 所以

我们取满足 $m^3 > n$ 的最小 m. 表 2.1 给出这三种点集的比较，显然 NTM 是最好的.

表 2.1 三种点集对应的误差 $p - \hat{p}$

n	等距格点集		随机数	n	glp 集合
64	$-2.215e^{-0.4}$	35	$-2.121e^{-0.3}$	35	$-1.162e^{-0.4}$
125	$-1.415e^{-0.4}$	101	$1.937e^{-0.3}$	101	$5.380e^{-0.5}$
729	$-4.358e^{-0.5}$	597	$6.349e^{-0.5}$	597	$-3.979e^{-0.6}$
1728	$-2.451e^{-0.5}$	1626	$-6.560e^{-0.5}$	1626	$6.688e^{-0.6}$
5832	$-1.090e^{-0.5}$	5037	$-3.248e^{-0.5}$	5037	$2.632e^{-0.7}$
39304	$-3.072e^{-0.6}$	39029	$1.342e^{-0.5}$	39029	$2.438e^{-09}$

若 $D = [\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}] = [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_s, b_s]$, 则积分

$$I(f) = \int_{[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]} f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \tag{2.1.9}$$

可以用和

$$I(f, \mathcal{P}_n) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(a_1 + (b_1 - a_1)c_{k1}, \cdots, a_s + (b_s - a_s)c_{ks}), \tag{2.1.10}$$

来近似，此处 $\mathcal{P}_n = \{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, \cdots, c_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$ 是一个 C^s 上的 NT–net, 因此集合

$$\{(a_1 + (b_1 - a_1)c_{k1}, \cdots, a_s + (b_s - a_s)c_{ks}),\ k = 1, \cdots, n\} \tag{2.1.11}$$

在 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 上均匀散布，即它为 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 上的一个 NT–net.

为了提高数值积分中蒙特卡罗方法的效果，有不少缩小方差的方法被设计出来，例如分层抽样、重要抽样、相关抽样与**对偶随机量方法** (Rubinstein (1981) 第四章). 我们对于一维的情况来介绍最后一种方法，此时

$$I(f) = \int_0^1 f(x)\, dx.$$

易见

$$\begin{aligned}I(f) &= \int_0^1 \frac{1}{2}(f(x) + f(1-x))\,dx \\ &= \int_0^1 g(x)\,dx.\end{aligned}$$

命 $\{x_1, \cdots, x_n\}$ 为一个随机数集合. 则

$$I(g,n) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} g(x_i) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(f(x_i) + f(1-x_i))$$

为 $I(f)$ 的近似, 在 (2.1.3) 中, $I(f,n)$ 的方差为 $\sigma^2(f)/n$. 由于在 $I(g,n)$ 中涉及到 $2n$ 个函数值, 所以 $I(g,n)$ 的方差 $\sigma^2(g)/n$ 需与 $\sigma^2(f)/2n$ 进行比较. 若 f 为 $[0, 1]$ 上的连续单调函数, 则可以证明

$$\sigma^2(g) \le \frac{1}{2}\sigma^2(f) \tag{2.1.12}$$

这说明了方差被降低 (Rubinstein (1981)). 这一方法可以推广到高维数值积分. 为简单计, 我们仅对 $s = 2$ 来阐明这一方法:

$$\begin{aligned}I(f) &= \int_0^1 \int_0^1 f(x,y)\,dxdy \\ &= \frac{1}{4}\int_0^1 \int_0^1 [f(x,y) + f(1-x,y) + f(x,1-y) \\ &\qquad + f(1-x,1-y)]\,dxdy \\ &= \int_0^1 \int_0^1 g(x,y)\,dxdy,\end{aligned} \tag{2.1.13}$$

此处

$$g(x,y) = \frac{1}{4}[f(x,y) + f(1-x,y) + f((x,1-y) + f(1-x,1-y)].$$

然后对函数 g 来运用公式 (2.1.3). 对于 s- 维的情况, 方开泰与朱力行 (1993) 证明了类似于 (2.1.12) 的结论. 这个方法可以用于

NT- 积分法，它被称为 **对称化方法**. 在很多情况下，这一方法显示有优越性. 我们还有一些被积函数对称化的其他方法 (华罗庚与王元 (1981), 第六章).

在 §1.3, 我们介绍了几个产生 NT–nets 的方法. 由定理 2.1 可知若 NT–nets $\mathcal{P}_n$ 的偏差小，则 $I(f,\mathcal{P}_n)$ 与 $I(f)$ 之差的绝对值亦小. 因 (2.1.5) 中的 n 常常较大，而 $\mathcal{P}_n$ 的偏差又不易精确估计，所以偏差并不是求积公式的误差估计的唯一度量. 许多作者用下面的方法来进行比较：选择几个产生 NT–nets 的方法及一些被积函数，它们对任何维数均有定义并且其积分值已知，然后对于不同的 s 及 NT–nets 与被积函数来进行比较. 这仅仅是一个 **启发性的方法**, 但在实际使用时却很有用处. 我们引用 Pagès 与 Xiao (1991) 上的一些数据. 他们用了如下的数值方法：

(a) gp–1; 其 $\boldsymbol{r}$ 由 (1.3.7) 定义；

(b) H– 集合；

(c) SH– 集合，即攀登的 Halton 集合；

(d) $\boldsymbol{HL}$–**集合**, 即 **Halton 型集合**;

(e) $\boldsymbol{F}$-**集合**, 即 **Faure 集合**;

(f) MC– 集合；即蒙特卡罗方法，它由一个经典的同余发生器生成；

$x_{n+1} = ax_n \pmod N$, 其中 $a = 31415821$, $N = 10^8$ 及 $x_0 = 10^4$. C^s 上的被积函数为

$$f_1(\boldsymbol{x}) = \sin\left(2\pi\sum_{i=1}^{s} x_i\right);$$

$$f_2(\boldsymbol{x}) = \left(\frac{3}{2}\right)^s \prod_{i=1}^{s}\left[(2x_i-1)\exp\left(1\Bigg/\sum_{i=1}^{s}(2x_i-1)^s\right)\right];$$

$$f_3(\boldsymbol{x}) = \prod_{i=1}^{s}|4x_i-1|;$$

$$f_4(\boldsymbol{x}) = \prod_{i=1}^{s}\exp(-2(x_i-0.5)^2),$$

所用的维数为 $s=2,3,5,10,15,20,25,30,40$. 由数值结果, 他们得到如下结论: 蒙特卡罗方法显然是最差的, 在大多数情况下 **gp-1 一贯** 都是最好的. Halton 型序列亦很有效. 正如 Braaten 与 Weller (1979) 在他们的工作中曾指出 **攀登的 Halton 序列** 的收敛速度比 **Halton 序列** 有显著的改进.

关于数值积分还有其他一些有用的技术 (Haselgrove (1961), 徐利治与周蕴时 (1980) 及 Davis 与 Rabinowitz (1984)), 本书不讨论这些成果.

§ 2.2 球与椭球对称分布

我们已经指出与多元正态分布有关的许多问题都得到了很好的解决. 但对于绝大多数非正态多元分布来说, 情况就完全不同了. 为了说明 NTM 的应用, 最好将它用于非正态分布. 本节, 我们将定义球与椭球对称分布, 它们是多元正态分布的推广, 而且将给予这些分布类以简单的讨论.

定义 2.1 如果对每一个 $s\times s$ 正交方阵 $\boldsymbol{P}$ 皆有

$$\boldsymbol{Px}\overset{\mathrm{d}}{=}\boldsymbol{x}. \tag{2.2.1}$$

则 $s\times 1$ 随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 称为遵从 **球对称分布** (或简称为 **球分布**).

下面的定理给出了球分布的重要性质, 即方开泰, Kotz 与吴启宏 (1990) 的书中的定理 2.5.

定理 2.2 命 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)'$ 为一个 $s\times 1$ 随机矢量. 则下列命题是等价的:

(a) $\boldsymbol{x}\overset{\mathrm{d}}{=}\boldsymbol{Px}$ 对每一个正交方阵 $\boldsymbol{P}$ 成立;

(b) $\boldsymbol{x}$ 的特征函数具有形状 $\phi(\boldsymbol{t}'\boldsymbol{t})$, 其中 $\phi: R_+\to R_+$ 为某一个标量函数, 而 $R_+=\{x: x>0\}$;

(c) $\boldsymbol{x}$ 有一个随机表示

$$\boldsymbol{x}\ \overset{\mathrm{d}}{=}\ R\boldsymbol{u}^{(s)}, \tag{2.2.2}$$

此处 $R\in R_+$ 是一个随机变量, 而且与 $\boldsymbol{u}^{(s)}\sim U(U_s)$ 是独立

的；

(d) 对于任何 $\boldsymbol{a}\in R^s$, 公式

$$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x} \overset{\mathrm{d}}{=} \|\boldsymbol{a}\|X_1, \tag{2.2.3}$$

成立，此处 $\|\boldsymbol{a}\|^2=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{a}, X_1$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的第一个分量.

随机表示 (2.2.2) 指出球分布的数目与全体非负随机变数 (诸 R) 是相同的. 所以我们称 R 为 $\boldsymbol{x}$ 的 **生成变元**. 一般说来，球分布不一定具有密度. 如果存在密度，则一定具有形状 $g(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x})$, 其中 $g:R_+\to R_+$ 为某一函数. 在这种情况下，我们将记为 $\boldsymbol{x}\sim S_s(g)$ 并称 g 为 **密度生成元**. 进而言之，我们有下面的事实：

定理 2.3 若 $\boldsymbol{x}\overset{\mathrm{d}}{=}R\boldsymbol{u}^{(s)}$ 有一个球分布，则 $\boldsymbol{x}$ 有一个密度生成元 $g(\cdot)$ 的充要条件是 R 有一密度 $f(\cdot)$, 而且 $g(\cdot)$ 与 $f(\cdot)$ 的关系为

$$f(r)=\frac{2\pi^{s/2}}{\Gamma(s/2)}r^{s-1}g(r^2). \tag{2.2.4}$$

证明见方开泰， Kotz 与吴启宏的书 ((1990), 35 页). 如果 $\boldsymbol{x}=R\boldsymbol{u}^{(s)}$ 的矩存在，则它们可以表为 R 的矩的函数. 对于偶数 $2t_i\geq 0,\ i=1,\cdots,s$, 我们有

$$E\left(\prod_{i=1}^{s}x_i^{2t_i}\right)=E(R^{2t})\pi^{-s/2}\frac{\Gamma(s/2)}{\Gamma(s/2+t)}\prod_{=1}^{s}\Gamma\left(\frac{1}{2}+t_i\right), \tag{2.2.5}$$

此处 $t=t_1+\cdots+t_s$. 特别我们有均值向量及 **协方差矩阵**

$$E(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0} \qquad 与 \qquad \mathrm{Cov}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{n}E(R^2)\boldsymbol{I}_s. \tag{2.2.6}$$

定理 2.4 假定 $s\geq 2$ 及 $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_s)'\sim S_s(g)$. 考虑 $\boldsymbol{x}$ 的球坐标变换

$$\begin{cases} x_j=R\left(\displaystyle\prod_{k=1}^{j-1}\sin\theta_k\right)\cos\theta_j, & 1\leq j\leq s-1,\\ x_s=R\left(\displaystyle\prod_{k=1}^{s-1}\sin\theta_k\right), \end{cases} \tag{2.2.7}$$

此处 $R \geq 0, \theta_k \in [0,\pi), k=1,\cdots,s-2, \theta_{s-1} \in [0,2\pi)$. 则

(a) $R, \theta_1, \cdots, \theta_{s-1}$ 相互独立；

(b) R 的 p. d. f. 由 (2.2.4) 给出；

(c) θ_k 的 p. d. f. 为

$$\frac{1}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{s-k}{2}\right)} \sin^{s-k-1} \theta_k, \qquad 0 \leq \theta_k < \pi, \qquad k=1,\cdots,s-2; \tag{2.2.8}$$

(d) $\theta_{s-1} \sim U(0,2\pi)$.

关于证明的细节与讨论， 请见方开泰， Kotz 与吴启宏的书 ((1990), 2.2 节).

定义 2.2 如果

$$\boldsymbol{x} \stackrel{\mathrm{d}}{=} \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{y} \stackrel{\mathrm{d}}{=} \boldsymbol{\mu} + R\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{u}^{(s)}, \tag{2.2.9}$$

此处 $\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的正平方根，$\boldsymbol{y}$ 遵从 s- 维球对称分布，则称 $s \times 1$ 随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 有一个 **椭球对称分布** (或简称为 **椭球分布**), 它具有参数 $\boldsymbol{\mu}: s\times 1$ 及 $\boldsymbol{\Sigma}: s\times s, \boldsymbol{\Sigma} \geq 0$. 若 $\boldsymbol{y} \sim S_s(g)$ 及 $\boldsymbol{\Sigma} > 0$, 则我们记 $\boldsymbol{x} \sim EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$. 变元 R 称为 $\boldsymbol{x}$ 的生成元.

当 $\boldsymbol{x} \sim EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$ 时， $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 为

$$|\det \boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} g((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})). \tag{2.2.10}$$

下面的例子无论对于本书或对于应用都是重要的.

例 2.1 多元正态分布.

若 $\boldsymbol{x} \sim EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$, 其中

$$g(u) = (2\pi)^{-s/2} \exp\left(-\frac{1}{2}u\right), \tag{2.2.11}$$

则称 $\boldsymbol{x}$ 有一个 **多元正态分布** $N_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$. 由 (2.2.10) 与 (2.2.11) 可知 $N_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 的 p.d.f. 为

$$(2\pi)^{-s/2} |\det \boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}. \tag{2.2.12}$$

其中

$$E(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\mu} \qquad 与 \qquad \mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\Sigma}. \tag{2.2.13}$$

例 2.2 对称 Kotz 型分布.

若 $\boldsymbol{x} \sim EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$, 此处

$$g(u) = C_s u^{N-1} \exp(-bu^t), \qquad b, t > 0, \quad 2N + s > 2, \tag{2.2.14}$$

其中 C_s 是正规化常数，我们则称 $\boldsymbol{x}$ 含有一个**对称 Kotz 型分布**. 当 $b = \frac{1}{2}, t = 1$ 及 $N = 1$ 时，这个分布即化为多元正态分布.

关于对称 Kotz 型分布更详细的讨论请见方开泰， Kotz 与吴启宏的书 ((1990) 3.2 节).

例 2.3 对称多元 Pearson 型 VII 分布.

若 $\boldsymbol{x} \sim EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$, 其中

$$g(u) = C_s(1 + t/m)^{-N}, \qquad N > s/2, \quad m > 0, \tag{2.2.15}$$

则称 $\boldsymbol{x}$ 有一个**对称多元 Pearson型VII分布**, 其中 C_s 是正规化常数：

$$C_s = (\pi m)^{-s/2}\Gamma(N)/\Gamma(N - s/2). \tag{2.2.16}$$

我们将这一分布记为 $\boldsymbol{x} \sim MPVII_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$.

对称多元 Pearson 型 VII 分布包括一些有用的分布，例如**多元 t-分布** (对应于 $N = \frac{1}{2}(m + s)$) 及**多元 Cauchy 分布** (对应于 $m = 1$ 及 $N = \frac{1}{2}(s+1)$). 我们将记多元 t 分布为 $\boldsymbol{x} \sim Mt_s(m, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$. 当 m 为正整数时，多元 t 分布可以定义为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}/W, \tag{2.2.17}$$

此处 $\boldsymbol{z} \sim N_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 独立于 $W \sim \chi_m$, 这儿 χ_m 为自由度 m 的 **Chi–分布**.

命 $\boldsymbol{x} \sim MPVII_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$, 其中 g 由 (2.2.15) 给出，及命 R 为

$\boldsymbol{x}$ 的生成元，则 $T=R^2$ 有 p.d.f.

$$\frac{1}{B(s/2,N-s/2)}m^{-s/2}t^{s/2-1}(1+t/m)^{-N}, \qquad t>0. \quad (2.2.18)$$

(方开泰， Kotz 与吴启宏 (1990), 82 页) 及

$$E(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\mu}, \qquad \mathrm{Cov}(\boldsymbol{x})=\frac{m}{2N-s-2}\boldsymbol{\Sigma}. \qquad (2.2.19)$$

例 2.4 对称多元 Pearson 型 II 分布.

若 $\boldsymbol{x}\sim EC_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$, 其中

$$g(u)=\frac{\Gamma(s/2+m+1)}{\Gamma(m+1)\pi^{s/2}}(1-u)^m, \qquad 0\le u\le 1, \quad m>-1, \qquad (2.2.20)$$

则称 $\boldsymbol{x}$ 有一个**对称多元 Pearson 型 II 分布**, 且记为 $\boldsymbol{x}\sim MPII_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$. $\boldsymbol{x}$ 的生成元 R 的 p.d.f. 为

$$\frac{2\Gamma(s/2+m+1)}{\Gamma(s/2)\Gamma(m+1)}r^{s-1}(1-r^2)^m, \qquad 0\le r\le 1, \qquad (2.2.21)$$

所以 $R^2\sim Be(s/2,m+1)$, 这儿 $Be(a,b)$ 表示参数为 (a,b) 为贝塔分布. $\boldsymbol{x}$ 的均值向量与协方差矩阵为

$$E(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\mu} \quad 与 \quad \mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{x})=(s+2m+2)^{-1}\boldsymbol{\Sigma}. \qquad (2.2.22)$$

例 2.5 多元均匀分布.

命 $\boldsymbol{u}^{(s)}$ 为 U_s 上的均匀分布随机矢量，即 $\boldsymbol{u}^{(s)}\sim U(U_s)$. 则对于任何 $\boldsymbol{x}\sim EC_s(\boldsymbol{0},I_s,g)$ 皆有

$$\boldsymbol{u}^{(s)} \overset{\mathrm{d}}{=} \boldsymbol{x}/\|\boldsymbol{x}\|. \qquad (2.2.23)$$

特别我们可以取 $\boldsymbol{x}\sim N_s(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_s)$, 这在例 1.11 中已经用过.

命 $\boldsymbol{x}\sim U(B_s)$, 则 $\boldsymbol{x}$ 遵从球分布，其生成元 R 有 p.d.f.

$$f(r)=\begin{cases} sr^{s-1}, & 若 \ 0\le r\le 1, \\ 0, & 其他情形. \end{cases} \qquad (2.2.24)$$

读者可以在方开泰， Kotz 与吴启宏 ((1990) 第三章) 的书中找到本节所提到所有例子的详细讨论.

§ 2.3 多元分布的概率的计算

本节我们将给出一些例子来说明如何用 NTM 来计算一个连续多元分布的概率. 我们仅考虑椭球分布类作为例子.

假定 $\boldsymbol{x} \sim N_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$. 则 $\boldsymbol{x}$ 有一个 p.d.f. (2.2.12). 一般说来, $\boldsymbol{x}$ 落于矩形 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 的概率没有解析表达式, 只能用数值计算来寻求. 有许多途径来处理这个问题 (董永良 (1990)), 这些方法通常可获得好的逼近, 但它们仅能用于多元正态分布. 但是, NTM 可以用于任意连续多元分布.

例 2.6 多元分布的定限概率.

如果随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 的期望为 $\mathbf{0}$, 则 $\boldsymbol{x}$ 落在第一卦限中的概率称为 **定限概率**. 当 $\boldsymbol{x} \sim N_s(\mathbf{0}, \boldsymbol{R})$ 时, 已有许多文献, 例如 Gupta (1963) 给了一个详细的综合讨论. Steck (1962) 给出等相关情况下与定限概率有关的重要结果一个综述. Johnson 与 Kotz (1972) 给出了一些其它文献与结果. 为了表明 NTM 在处理这个问题时的精度, 我们给出下面的例子.

记 $\boldsymbol{R} = (\rho_{ij})$ 为 $\boldsymbol{x}$ 在 R^3 中的相关矩阵. 则已知定限概率等于

$$
\begin{aligned}
p &= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (2\pi)^{-3/2} |\det \boldsymbol{R}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \boldsymbol{x}' \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{x} \right\} d\boldsymbol{x} \\
&= \frac{1}{8} + \frac{1}{4\pi} (\arcsin \rho_{12} + \arcsin \rho_{13} + \arcsin \rho_{23}). \qquad (2.3.1)
\end{aligned}
$$

现在我们用 NTM 来计算 p. 由正态分布的性质可知

$$
p \approx \int_0^5 \cdots \int_0^5 (2\pi)^{-3/2} |\det \boldsymbol{R}|^{-1/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \boldsymbol{x}' \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{x} \right\} d\boldsymbol{x}. \qquad (2.3.2)
$$

利用 glp 集合及 (2.1.10), 我们得到 (2.3.2) 右端的近似值. 当 $\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{23} = 0.5$ 时, 结果列于表 2.2 中. 由表 2.2 可见, 当 n 愈大, 则一般言之, 结果愈好. 但偶然也有相反的情况出现, 例如 $n = 2440$ 时结果就优于 $n = 10,007$ 时的结果.

表 2.2　定限概率 ($\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{23} = 0.5$)

n	p 的近似值	误差
135	0.2599914	1.000×10^{-2}
1010	0.2505930	5.93×10^{-4}
2440	0.2502970	2.97×10^{-4}
4040	0.2503471	3.47×10^{-4}
5037	0.2498223	-1.77×10^{-4}
10,007	0.2512536	1.25×10^{-3}
39,024	0.2500323	3.23×10^{-5}
∞	0.25	

尽管 (2.3.2) 中积分的被积函数不很陡，如果用被积函数对称化方法，计算精度可望进一步提高. 但需注意在应用对称化方法时，计算积分所需的点数亦需增加，即对于 s 重积分来说，所需点数为原来所需点数的 2^s 倍. 在表 2.3 中，在列 n 中 n 的实际数值应为括弧中的数值，即 $2^3 \times n = 8n$. 比较表 2.2 与表 2.3, 我们见到当被积函数对称化方法使用后，计算的精度的确被提高了.

表 2.3　定限概率 (对称化方法, $\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{23} = 0.5$)

n	p 的近似值	误差
135(1080)	0.2508592	8.59×10^{-4}
597(4776)	0.2501168	1.17×10^{-4}
1010(8080)	0.2500185	1.85×10^{-5}
2440(19,520)	0.2500008	8.00×10^{-7}
∞	0.25	

例 2.7　多元 t 分布的定限概率.

多元 t 分布已经在例 2.3 中定义了. 令 $\boldsymbol{x} \sim Mt_s(m, \mathbf{0}, \boldsymbol{R})$, 此处 $\boldsymbol{R}$ 为 $\boldsymbol{x}$ 的相关矩阵. 方开泰, Kotz 与吴启宏 ((1990) 2.7 节) 的书中证明了 $Mt_s(m, \mathbf{0}, \boldsymbol{R})$ 与 $N_s(\mathbf{0}, \boldsymbol{R})$ 有相同的定限概率.

$Mt_s(m,\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的 p.d.f. 可以由例 2.3 求得：

$$\frac{\Gamma((s+m)/2)}{(\pi m)^{s/2}\Gamma(m/2)}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2}(1+m^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}))^{-(s+m)/2}. \quad (2.3.3)$$

当 $\boldsymbol{x}\sim Mt_3(2,\mathbf{0},\boldsymbol{R})$ 且 $\rho_{12}=\rho_{13}=\rho_{23}=0.5$ 时，由例 2.6 得知定限概率为 0.25. 我们用近似关系

$$\begin{aligned} p &= \frac{\Gamma(2.5)}{(2\pi)^{1.5}\Gamma(1)}|R|^{-1/2}\int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\left(1+\frac{1}{2}\boldsymbol{x}'R^{-1}\boldsymbol{x}\right)^{-2.5}d\boldsymbol{x} \\ &\cong \frac{\Gamma(2.5)}{(2\pi)^{1.5}}|R|^{-1/2}\int_0^{A}\int_0^{A}\int_0^{A}\left(1+\frac{1}{2}\boldsymbol{x}'R^{-1}\boldsymbol{x}\right)^{-2.5}d\boldsymbol{x} \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

及数值积分的 NTM 来计算 p. 因当 $x\to\infty$ 时，函数 $(1+\frac{1}{2}x^2)^{-0.25}$ 的收敛速度慢于 $\exp(-\frac{1}{2}x^2)$, 所以在 (2.3.4) 中的值 A 要取得比 5 大些. 如何选取 A 呢？一般说来，这在应用数值积分的 NTM 时是一个困难问题.

我们选取 A 使在被略去的区域上的积分值不超过给予的精度 ϵ. 若 A 取得太小，则积分的近似值比其真值小得太多. 否则，由于被积函数在一个大的区域中的值接近于 0, 所以必须用很多点才能保证积分的近似值有较高的精确度. 因此我们常常用 **试验法** 来选取一个适当的值 A. 在这个例子里，我们试了 $A=8,9,10,11,12$ 并用被积函数对称化法之后计算各积分. 结果列在表 2.4 中. 我们发现 $A=10$ 是最好的. 遗憾的是我们还没有一个统一的方法将一个无限区域上的积分近似化为一个在有界区域上积分. 进一步的讨论将在 §4.7 进行.

表 2.4 多元 t 分布的定限积分

n	$A=8$	$A=9$	$A=10$	$A=11$	$A=12$
101	0.2680093	0.2878872	0.3150274	0.3509449	0.3969012
135	0.2631638	0.2788493	0.2992300	0.3254924	0.3587046
307	0.2470927	0.2531881	0.2605061	0.2696726	0.2812716
597	0.2428794	0.2465284	0.2504974	0.2551893	0.2609337
701	0.2426810	0.2460799	0.2495917	0.2535489	0.2582208

§ 2.4 有界区域上的数值积分

命 D 是一个 R^s 上的有界闭区域，$f(\boldsymbol{x})$ 为一个在 D 上定义的连续函数. 考虑积分

$$I(f)=\int_D f(\boldsymbol{x})\,dv, \tag{2.4.1}$$

此处 dv 是 D 的体积元素. 当 $D=[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 时，我们已在前几节讨论了 $I(f)$ 的数值积分. 我们现在介绍 $I(f)$ 的数值计算的三种方法：

2.4.1 指标函数法

假定 D 的维数是 s 及 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 是 D 的外接矩形. 则得

$$I(f)=\int_{[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]} I_D(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}, \tag{2.4.2}$$

此处 $I_D(\boldsymbol{x})$ 为 D 的指标函数，即

$$I_D(\boldsymbol{x})=\begin{cases}1, & 若\ \ \boldsymbol{x}\in D,\\ 0, & 其它情形.\end{cases} \tag{2.4.3}$$

然后我们将 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 上面的数值积分法用于积分 (2.4.2). 假定 $\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$ 是 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 上的一个 NT–net, 且 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 中有 m 个点 $\{\boldsymbol{x}_{i_k}, k=1,\cdots,m\}$ 落在 D 上. 则积分 $I(f)$ 可以用

$$\tilde{I}(f,n)=\frac{1}{n}v([\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}])\sum_{k=1}^{m} f(\boldsymbol{x}_{i_k}) \tag{2.4.4}$$

来近似，此处 $v([\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}])$ 表示 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 的体积. 我们可以将 (2.4.4) 改写为

$$\tilde{I}(f,n)=\frac{1}{m}\Big(\frac{m}{n}v([\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}])\Big)\sum_{k=1}^{m} f(\boldsymbol{x}_{i_k})\cong\frac{1}{m}v(D)\sum_{k=1}^{m} f(\boldsymbol{x}_{i_k}), \tag{2.4.5}$$

此处 $\frac{m}{n}v([\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}])$ 可以看作 D 的体积的近似值，只要点集在 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 上均匀散布即可 (§1.5). 因此 (2.4.5) 是合理的，指标函数法在很多情况下是有效的. 但是 D 的边界点通常是函数 $I_D(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x})$ 在 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 上的不连续点，而且 $\{\boldsymbol{x}_{i_k}\}$ 在 D 上的散布不一定很均匀，所以这一方法的精度不是很高的. 如果 $v(D)$ 能准确地求出，则公式

$$I^*(f,n)=\frac{1}{m}v(D)\sum_{k=1}^{m}f(\boldsymbol{x}_{i_k}) \tag{2.4.6}$$

可以用来逼近 $I(f)$. 一些例子表明 $I^*(f,n)$ 比 $\tilde{I}(f,n)$ 略为好些.

例 2.8 用指标函数法找出积分

$$I=\int\int_{x^2+y^2\le 1}(1+x+y)e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\,dxdy \tag{2.4.7}$$

的近似值.

我们知道

$$I=\int\int_{x^2+y^2\le 1}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\,dxdy=2\pi(1-e^{-\frac{1}{2}})\cong 2.4722408.$$

故由 (2.4.4) 与 (2.4.6) 得

$$\tilde{I}(f,n)=\frac{1}{n}2^2\sum_{k=1}^{m}f(\boldsymbol{x}_{i_k})=\frac{4}{n}\sum_{k=1}^{m}f(\boldsymbol{x}_{i_k})$$

与

$$I^*(f,n)=\frac{\pi}{m}\sum_{k=1}^{m}f(\boldsymbol{x}_{i_k}),$$

此处 $v(D)=v(B_2)=\pi$. 计算结果列于表 2.5 之中，从表中可以看出 $I^*(f,n)$ 给出的结果常常比 $\tilde{I}(f,n)$ 的为好.

表 2.5 指标函数法

n	m	$\tilde{I}(f,n)$ 的误差	$I^*(f,n)$ 的误差
144	109	9.422×10^{-2}	4.862×10^{-3}
233	183	1.744×10^{-2}	1.737×10^{-2}
377	298	2.241×10^{-3}	1.360×10^{-2}
610	483	2.000×10^{-2}	1.900×10^{-4}
987	772	1.065×10^{-3}	1.125×10^{-2}
1587	1248	1.876×10^{-3}	1.276×10^{-3}
2584	2029	1.896×10^{-3}	1.359×10^{-3}
4181	3276	5.357×10^{-3}	4.446×10^{-4}
6765	5306	2.266×10^{-3}	1.060×10^{-3}
10,946	8585	2.969×10^{-3}	4.403×10^{-4}

2.4.2 变换法

在介绍所谓变换法之前，我们先来处理例 2.8. 命

$$x = r\cos(2\pi\theta), \qquad y = r\sin(2\pi\theta).$$

则由 (2.4.7) 定义的 I 化为 (2.1.1) 型的一个积分

$$I = \int_0^1 \int_0^1 (1 + r\cos(2\pi\theta) + r\sin(2\pi\theta))2\pi r e^{-\frac{1}{2}r^2}\, d\theta dr.$$

应用 (2.1.3) 去计算 $I(f,n)$, 结果列于表 2.6 的第二列. 与表 2.5 比较可知变换法比指标函数法为佳，当 $n\to\infty$ 时，变换法所导致的误差项平稳地趋于零. 表 2.6 的最后一列将于以后解释.

现在我们来介绍变换法. 假定 D 有一个表示

$$x_j = x_j(\phi_1,\cdots,\phi_t) = x_j(\boldsymbol{\phi}), \qquad j = 1,\cdots,s\ (\geq t), \tag{2.4.8}$$

此处 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1,\cdots,\phi_t) \in C^t$, 且 $x_j(\boldsymbol{\phi}), j = 1,\cdots,s$ 关于每一个 $\phi_i, i = 1,\cdots,t$, 在 $[0,1]$ 上有连续导数. 命

$$\boldsymbol{T} = \left(\frac{\partial x_j}{\partial \phi_i}\right), \qquad i = 1,\cdots,t, \quad j = 1,\cdots,s$$

为一个 $t\times s$ 矩阵. 置

$$J(\boldsymbol{\phi})=\det(\boldsymbol{TT'})^{1/2}. \tag{2.4.9}$$

当 $t=s$ 时, $J(\boldsymbol{\phi})$ 就是变换 (2.4.8) 的雅可比. 所以

$$I(f)=\int_D f(\boldsymbol{x})\,dv=\int_{C^t} f(\boldsymbol{x}(\phi))J(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}, \tag{2.4.10}$$

此处 $x(\boldsymbol{\phi})=(x_1(\boldsymbol{\phi}),\cdots,x_s(\boldsymbol{\phi}))$ 及 $d\boldsymbol{\phi}=\prod_{j=1}^t d\phi_j$ (华罗庚 (1984)). 所以 C^t 上的一个求积公式诱导出 D 上的一个求积公式. 特别当 $f\equiv 1$ 时, 我们得到 D 的体积的积分表示

$$v(D)=\int_{C^t} J(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}. \tag{2.4.11}$$

命 $\{\boldsymbol{c}_k,\ k=1,\cdots,n\}$ 为 C^t 上的一个 NT-net, 则由 (2.1.5) 与 (2.4.10) 建议由

$$I(f,n)=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} f(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{c}_k))J(\boldsymbol{c}_k) \tag{2.4.12}$$

来近似 $I(f)$. 为方便于应用, 我们给出区域 A_s, B_s, U_s, T_s 与 V_s (§1.5) 所相应的公式 (2.4.10) 与求积公式. 以下我们总是记 $\{\boldsymbol{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{kt}),\ k=1,\cdots,n\}$ 为 C^t 上的一个 NT–net, 而用 $\{\boldsymbol{c}_{i_k}, k=1,\cdots,m\}$ 表示 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 中落于 D 中的点.

表 2.6　变换法与直接法

n	变换法的误差	直接法的误差
144	1.820×10^{-2}	3.087×10^{-1}
233	4.860×10^{-3}	5.436×10^{-3}
377	6.994×10^{-3}	5.395×10^{-3}
610	1.890×10^{-3}	2.115×10^{-3}
987	2.679×10^{-3}	1.347×10^{-3}
158	2.403×10^{-3}	8.310×10^{-4}
258	1.022×10^{-4}	5.060×10^{-4}
418	2.849×10^{-4}	3.170×10^{-4}
676	3.939×10^{-4}	1.970×10^{-4}
10,946	1.027×10^{-4}	1.220×10^{-4}

(a) $\boldsymbol{A}_s$ 上的积分

A_s 由 (1.5.12) 定义，它有表示 (1.5.18). 由附录 B. 1 可知

$$J(\boldsymbol{\phi})=\prod_{i=2}^{s}\phi_i^{i-1} \tag{2.4.13}$$

$$v(A_s)=\int_{C^s}\left(\prod_{i=2}^{s}\phi_i^{i-1}\right)d\boldsymbol{\phi}=\frac{1}{s!}. \tag{2.4.14}$$

所以

$$I(f)=\int_{A_s}f(\boldsymbol{x})\,dv=\int_{C^s}f(\boldsymbol{x}(\phi))\Big(\prod_{i=2}^{s}\phi_i^{i-1}\Big)\,d\boldsymbol{\phi} \tag{2.4.15}$$

由 (2.4.12) 与 (2.4.6) 得

$$I(f,n)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_k))\Big(\prod_{i=2}^{s}c_{ki}^{i-1}\Big) \tag{2.4.16}$$

及

$$I^*(f,n)=\frac{1}{m\times s!}\sum_{k=1}^{m}f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_{i_k})). \tag{2.4.17}$$

下一节，我们用这两个公式来计算次序统计量的矩.

(b) $\boldsymbol{B}_s$ 上的积分

B_s 由 (1.5.13) 定义，它有表示 (1.5.21). 由附录 B. 2 可知

$$J(\boldsymbol{\phi})=2\pi^{s-1}\phi_1^{s-1}\prod_{i=2}^{s}S_i^{s-i},$$

此处 $S_i=\sin(\pi\phi_i), i=2,\cdots,s$. 由 (2.4.11) 得

$$\begin{aligned}v(B_s)=&\int_{C^s}\left[2\pi^{s-1}\phi_1^{s-1}\prod_{i=2}^{s}\big(\sin(\pi\phi_i)\big)^{s-i}\right]d\boldsymbol{\phi}\\=&2\pi^{s-1}\int_0^1\phi_1^{s-1}\,d\phi_1\prod_{i=2}^{s}\int_0^1\big(\sin(\pi\phi_i)\big)^{s-i}\,d\phi_i\\=&\frac{2}{s}\prod_{i=2}^{s}B\left(\frac{1}{2},\frac{s-i+1}{2}\right).\end{aligned}$$

其中用到当 m 为正整数时，

$$\int_0^1 \left(\sin(\pi x)\right)^m dx = \frac{1}{\pi} B\left(\frac{1}{2}, \frac{m+1}{2}\right).$$

由于 $B(a,b) = \Gamma(a)\Gamma(b)/\Gamma(a+b)$，故得

$$v(B_s) = \frac{2\pi^{s/2}}{s\Gamma(s/2)}. \tag{2.4.18}$$

因此

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_{B_s} f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \\ &= \int_{C^s} \left[f(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi})) 2\pi^{s-1} \phi_1^{s-1} \prod_{i=2}^{s} \left(\sin(\pi\phi_i)\right)^{s-i} \right] d\boldsymbol{\phi}, \end{aligned} \tag{2.4.19}$$

$$I(f,n) = \frac{2\pi^{s-1}}{n} \sum_{k=1}^{n} f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_k)) c_{k1}^{s-1} \prod_{i=2}^{s} \left(\sin(\pi c_{ki})\right)^{s-i}, \tag{2.4.20}$$

及

$$I^*(f,n) = \frac{2\pi^{s/2}}{sm\Gamma(s/2)} \sum_{k=1}^{m} f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_{i_k})). \tag{2.4.21}$$

显然，例 2.8 是 $s = 2$ 及 $f(x,y) = (1 + x + y)e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}$ 之特例.

(c) $\boldsymbol{U_s}$ **上的积分**

U_s 由 (1.5.14) 定义，它有表示 (1.5.27). 由附录 B. 2 及 (2.4.1) 可知

$$J(\boldsymbol{\phi}) = 2\pi^{s-1} \prod_{i=1}^{s-2} \left(\sin(\pi\phi_i)\right)^{s-i-1} \tag{2.4.22}$$

及

$$v(U_s) = 2\pi \prod_{i=1}^{s-2} B\left(\frac{1}{2}, \frac{s-i}{2}\right) = \frac{2\pi^{s/2}}{\Gamma(s/2)}. \tag{2.4.23}$$

所以

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \int_{U_s} f(\boldsymbol{x})\, dv \\
&= \int_{C^{s-1}} \left[f(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi})) 2\pi^{s-1} \prod_{i=1}^{s-2} \left(\sin(\pi\phi_s) \right)^{s-i-1} \right] d\boldsymbol{\phi}
\end{aligned} \tag{2.4.24}
$$

及

$$
I(f,n) = \frac{2\pi^{s-1}}{n} \sum_{k=1}^{n} f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_k)) \prod_{i=1}^{s-2} \left(\sin \pi c_{ki} \right)^{s-i-1}. \tag{2.4.25}
$$

注意由于 U_s 的维数 $t = s-1 < s$, 所以没有相应的求积公式 $I^*(f,n)$. 当被积函数为次数 ≤ 7 的多项式时, Stroud (1967) 得到一些关于 $I(f)$ 的求积公式.

(d) $\boldsymbol{V}_s$ 上的积分

V_s 由 (1.5.15) 定义, 它有表示 (1.5.29). 由附录 B. 3 及 (2.4.11) 可知

$$
J(\boldsymbol{\phi}) = (\pi\phi_1)^{s-1} \prod_{j=2}^{s} \left(\sin\left(\frac{\pi\phi_j}{2} \right) \right)^{2s-2j-1} \cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2} \right), \tag{2.4.26}
$$

从而

$$
\begin{aligned}
v(V_s) &= \pi^{s-1} \int_0^1 \phi_1^{s-1}\, d\phi_1 \prod_{j=2}^{s} \int_0^1 \left(\sin \frac{\pi\phi_j}{2} \right)^{2s-2j+1} \cos\left(\frac{\pi\varphi_j}{2} \right) d\phi_j \\
&= \frac{1}{s!}.
\end{aligned} \tag{2.4.27}
$$

所以

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \int_{V_s} f(\boldsymbol{x})\,dv \\
&= \pi^{s-1}\int_{C^s}\phi_1^{s-1} f(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi})) \\
&\quad \times \left[\prod_{j=2}^{s}\left(\sin\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\right)^{2s-2j+1}\cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\right] d\boldsymbol{\phi},
\end{aligned}
\tag{2.4.28}
$$

$$
\begin{aligned}
I(f,n) &= \frac{\pi^{s-1}}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_k))c_{k1}^{s-1} \\
&\quad \times \prod_{j=2}^{s}\left(\sin\left(\frac{\pi c_{kj}}{2}\right)\right)^{2s-2j+1}\cos\left(\frac{\pi c_{kj}}{2}\right),
\end{aligned}
\tag{2.4.29}
$$

及

$$
I^*(f,n) = \frac{1}{s!m}\sum_{k=1}^{m} f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_{i_k})). \tag{2.4.30}
$$

(e) T_s 上的积分

T_s 由 (1.5.16) 定义，它有表示 (1.5.32). 由附录 B. 3 及 (2.4.11) 可得

$$
J(\boldsymbol{\phi}) = \pi^{s-1}\sqrt{s}\prod_{j=1}^{s-1}\left(\sin\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\right)^{2s-2j-1}\cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right), \tag{2.4.31}
$$

从而

$$
v(T_s) = \int_{C^{s-1}} J(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi} = \sqrt{s}/(s-1)! \tag{2.4.32}
$$

所以

$$
\begin{aligned}
I(f,n) &= \frac{\pi^{s-1}\sqrt{s}}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\boldsymbol{x}(\mathbf{c}_k)) \\
&\quad \times \prod_{j=1}^{s-1}\left(\sin\left(\frac{\pi c_{kj}}{2}\right)\right)^{2s-2j-1}\cos\left(\frac{\pi c_{kj}}{2}\right).
\end{aligned}
\tag{2.4.33}
$$

因 $t=s-1$, 所以没有相应的公式 $I^*(f,n)$.

由一些熟知的变换, 我们还可以得到更多的求积公式, 例如, 当 D 是一个椭球体与椭球面时的求积公式 (习题 2.10).

2.4.3 直接法

命 $\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$ 为 D 上的一个 NT–net. 则我们有

$$\begin{aligned}I(f)=&v(D)\int_D f(\boldsymbol{x})\frac{1}{v(D)}\,d\boldsymbol{x}\\=&v(D)\int_D f(\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x},\end{aligned}$$

此处 $p(\boldsymbol{x})=\frac{1}{v(D)}$ 为 $U(D)$ 的 p.d.f. 由 NT- 均值方法得

$$I(f)\cong I(f,n)=\frac{1}{n}v(D)\sum_{k=1}^{n}f(\boldsymbol{x}_k). \tag{2.4.34}$$

这是数值积分的**直接法**. 例如取 $D=B_2$, 则由 §1.5 的方法我们可以有 B_2 上的一个 NT–net, 然后将这一集合及公式 (2.4.34) 用于例 2.8, 所以结果与变换法几乎有同等的精度 (表 2.6 第三列). 精确地说, 直接法常常导致比变换法更好的结果 (§2.5, 例 2.9). 现在我们来寻求公式 (2.4.34) 的误差估计.

假定随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 在 D 上均匀分布及 $\boldsymbol{x}$ 有一个随机表示

$$\boldsymbol{X}_j=x_j(\phi_1,\cdots,\phi_t)=x_j(\boldsymbol{\phi}),\qquad j=1,\cdots,t,$$

此处 $t\le s$ 及 $\boldsymbol{\phi}\in C^t$. 我们还假定 $\phi_1,\cdots,\phi_t$ 相互独立并分别有 c.d.f. $G_1(x_1),\cdots,G_t(x_t)$. 若 $\{\boldsymbol{c}_k,k=1,\cdots,n\}$ 为 C^t 上一个有偏差 d 的点集. 则 $\{\boldsymbol{b}_k=(G_1^{-1}(c_{k1}),\cdots,G_t^{-1}(c_{kt})),k=1,\cdots,n\}$ 有 F- 偏差 d (例 1.5). 从而集合 $\mathcal{P}_n=\{\boldsymbol{x}(\boldsymbol{b}_k),k=1,\cdots,n\}$ 关于 $G(\boldsymbol{x})=\prod_{i=1}^t G_i(x_i)$ 有伪 F- 偏差 d. 置

$$h(\boldsymbol{\psi})=f(\boldsymbol{x}(G^{-1}(\boldsymbol{\psi}))),$$

此处 $\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{\psi})=(G_1^{-1}(\psi_1),\cdots,G_t^{-1}(\psi_t))$.

定理 2.5 假定 $h(\boldsymbol{\psi})$ 有连续导数 $\partial^t h/(\partial\psi_1\cdots\partial\psi_t)$ 且有常数 C 使

$$\left|\frac{\partial^l h(\boldsymbol{\psi})}{\partial\psi_{i_1}\cdots\partial\psi_{i_l}}\right|\le C,\qquad 1\le i_1<\cdots<i_l\le t,\quad 1\le l\le t,$$

则

$$\left|\int_D f(\boldsymbol{x})\,dv-\frac{v(D)}{n}\sum_{k=1}^n f(\boldsymbol{x}_k)\right|\le 2^s C v(D) d.$$

证 由于

$$\int_D f(\boldsymbol{x})\,dv=\int_{C^t} f(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi}))J(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}$$

及由 (2.4.11)

$$\int_{C^t}\frac{1}{v(D)}J(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}=\int_{C^t} dG_1(\phi_1)\cdots dG_t(\phi_t)=\int_{C^t} d\psi_1\cdots d\psi_t=1,$$

此处我们置

$$G_i^{-1}(\psi_i)=\phi_i,\qquad i=1,\cdots,t,$$

所以

$$\int_D f(\boldsymbol{x})\,dv=v(D)\int_{C^t} f(\boldsymbol{x}(G^{-1}(\boldsymbol{\psi})))\,d\boldsymbol{\psi}=v(D)\int_{C^t} h(\boldsymbol{\psi})\,d\boldsymbol{\psi}.$$

因此由 (2.1.8) 得

$$\begin{aligned}&\left|\int_D f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}-\frac{v(D)}{n}\sum_{k=1}^n f(\boldsymbol{x}_k)\right|\\ =&v(D)\left|\int_{C^t} h(\boldsymbol{\psi})\,d\boldsymbol{\psi}-\frac{1}{n}\sum_{k=1}^n h(\boldsymbol{c}_k)\right|\le 2^s C v(D) d.\end{aligned}$$

定理证毕. □

注记 2.1

(a) 指标函数方法只有当 D 的维数为 s 时才能用，而关于区域 D 的限制是不多的.

(b) 若有一个可微映射将 C^t 映入 D, 而且 f 的导数连续，则我们可以用变换法.

(c) 如果我们能在 D 上找到一个 NT-net, 则可以用直接法.

(d) 在这三个方法之中，直接法常常是最好的. 而变换法又经常比指标函数法为佳. 如果 $v(D)$ 的准确值出现在求积公式之中，则总是有利的. 在以下诸节，我们将给出数值积分的 NTM 在统计中的若干应用.

(e) 在 §4.7 中，我们将介绍统计中的数值积分的一些其他方法.

§ 2.5 顺序统计量的矩

顺序统计量在统计中有广泛的应用. David (1981) 给予顺序统计量的理论与应用一个系统的阐述. 因为它们的矩一般没有解析表达式，我们只能用数值方法以求出它们的近似值. Arnold 与 Balakrishnan (1989) 给出顺序统计量的数值计算一个详细的叙述. 本节我们仅给出顺序统计量的矩的数值计算 (张金廷 (1990)), 而不涉及顺序统计量的其他方面. 命 $X_1, \cdots, X_N$ 为总体分布 $F(x)$ 的一个样本，记 $X_{(1)} \le X_{(2)} \le \cdots \le X_{(N)}$ 为它的顺序统计量. 令 $Y_i = X_{(i)}, i = 1, \cdots, N$.

(a) $Y_1, \cdots, Y_N$ 的联合密度为

$$p(y_1, \cdots, y_N) = N! \prod_{i=1}^{N} p(y_i), \qquad (2.5.1)$$

此处 $p(y)$ 是 $F(y)$ 的 p.d.f.

(b) $Y_r = X_{(r)}$ 的 p.d.f. 为

$$p_r(y) = \frac{N!}{(r-1)!(N-r)!} F^{r-1}(y)(1-F(y))^{N-r}p(y); \quad (2.5.2)$$

(c) 任意 s 个顺序统计量 $Y_{i_1}, \cdots, Y_{i_s}$ 的 p.d.f. 为

$$\begin{aligned}&p_{i_1,\cdots,i_s}(y_1,\cdots,y_s)\\ =&N!\prod_{j=0}^{s}\frac{(F(y_{j+1})-F(y_j))^{i_{j+1}-i_j-1}}{(i_{j+1}-i_j-1)!}\prod_{k=1}^{s}p(y_k),\end{aligned} \quad (2.5.3)$$

此处 $0 < s \leq N$, $0 = i_0 < i_1 < \cdots < i_s < i_{s+1} = N+1$ 及 $-\infty = y_0 < y_1 < \cdots < y_s < y_{s+1} = \infty$ (David (1981)). 因此 $Y_{i_1}, \cdots, Y_{i_s}$ 的 $r_1, \cdots, r_s$ 阶的**混合矩**等于

$$\begin{aligned}&M_{i_1,\cdots,i_s}(r_1,\cdots.r_s) = E(Y_{i_1}^{r_1}\cdots Y_{i_s}^{r_s})\\ =&N!\int_D \prod_{k=1}^{s}(y_k^{r_k}p(y_k))\prod_{j=0}^{s}\frac{(F(y_{j+1})-F(y_j))^{i_{j+1}-i_j-1}}{(i_{j+1}-i_j-1)!}dv,\end{aligned} \quad (2.5.4)$$

此处

$$D = \{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{x} \in R^s,\ x_1 < \cdots < x_s\}, \quad (2.5.5)$$

dv 表示 D 的体积元素. 我们在前几节没有讨论过这个区域 D. 注意在 (2.5.5) 的定义中如果将某些 "$<$" 换成 "$\leq$", 则 (2.5.4) 的值是不变的. 所以在 D 的定义中, 如果将某些 "$<$" 换成 "$\leq$", 我们认为是没有区别的.

如果 $p(x)$ 在 $[0,1]$ 以外的值为 0, 则相应的 D 就是 $A_s = \{0 \leq X_1 \leq \cdots \leq X_s \leq 1\}$, 则公式 (2.4.16) 与 (2.4.17) 给出计算 (2.5.4) 的变换法与直接法. 由后者得:

$$\begin{aligned}&M_{i_1,\cdots,i_s}(r_1,\cdots.r_s)\\ \simeq&\frac{N!}{s!\,n}\sum_{k=1}^{n}\left[\prod_{l=1}^{s}(x_{kl}^{r_l}p(x_{kl})\right]\prod_{j=0}^{s}\frac{(F(x_{k,j+1})-F(x_{kj}))^{i_{j+1}-i_j-1}}{(i_{j+1}-i_j-1)!}.\end{aligned} \quad (2.5.6)$$

特别当 $F(x)$ 是 $[0,1]$ 上的均匀分布时，顺序统计量的混合矩有解析表达式

$$M_{i_1,\cdots,i_s}(r_1,\cdots.r_s)=\prod_{j=1}^{s}\prod_{k=i_j}^{i_{j+1}-1}\frac{k}{\sum_{l=1}^{j}r_l+k}$$
$$=\frac{i_1^{[r_1]}(r_1+i_2)^{[r_2]}\cdots(r_1+\cdots+r_{s-1}+i_s)^{[r_s]}}{(N+1)^{[r_1+\cdots+r_s]}},\tag{2.5.7}$$

此处 $[x]^r=x(x+1)\cdots(x+r-1)$. 故由 (2.5.7) 立刻推出

$$E(Y_i^r)=\frac{(r+i-1)!N!}{(i-1)!(N+r)!},\qquad r=1,2,\cdots$$

及

$$E(Y_iY_j)=\frac{i(j+1)}{(N+1)(N+2)},\qquad 1\le i<j\le N.$$

因均匀分布的顺序统计量有解析表达式，所以我们可以用它来检验 NTM 用来计算顺序统计量时的误差估计.

例 2.9 取 $s=3, N=7, i_1=1, i_2=3$ 与 $i_3=5$. 表 2.7 列出顺序统计量的矩的真值，及由数值积分的变换法与直接法获得的值. 此处 $n=10,007$. 我们看出直接法比变换法好些.

表 2.7 U (0, 1) 的顺序统计量的矩

(r_1,r_2,r_3)	真值	变换法的误差	直接法的误差
(1, 0, 0)	0.125	2.0×10^{-7}	1.0×10^{-7}
(2, 0, 0)	0.02777778	8.0×10^{-8}	1.0×10^{-8}
(3, 0, 0)	8.33333333	6.2×10^{-8}	1.6×10^{-8}
(1, 1, 0)	0.05555556	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-8}
(1, 2, 0)	0.02777778	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-8}
(1, 3, 0)	0.01515152	1.6×10^{-7}	1.0×10^{-8}
(1, 2, 3)	0.01165501	1.4×10^{-7}	1.0×10^{-8}

如果 p.d.f. $f(\boldsymbol{x})$ 是在无穷区间上定义的，则我们需计算区域为 (2.5.5) 的积分. 我们必须将 D 化为有限区域致使 NTM 可以

应用. 这就是说我们必须找到满足 $-\infty < A < B < \infty$ 的区域 (A,B), 并且用

$$D(A,B) = \{\boldsymbol{x}: A \le X_1 \le \cdots < X_s \le B\} \tag{2.5.8}$$

来代替 D, 而在 D 上的积分与在 $D(A,B)$ 上的积分值之差不超过一个给定的正数. 用线性变换

$$y_i = (x_i - A)/(B - A), \qquad i = 1, \cdots, s,$$

可得

$$\begin{aligned}&\int_{D(A,B)} f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}\\ =&(B-A)^s \int_{A_s} f(A+(B-A)y_1, \cdots, A+(B-A)y_s)\, dv,\end{aligned}$$

然后我们就能用前几节叙述的方法求得上面积分的近似值. 因此剩下的问题为如何找到两个适当的数 A 与 B. 类似于例 2.7, 我们没有一个处理这个问题的统一方法. 我们可以用试验法, 即我们试验几个区间 (A_i, B_i), $i = 1, \cdots, m$, 从中找出一个最好的 (A_{i_0}, B_{i_0}). 我们常常选一个区间 (A,B), 在它上面的积分值是已知的, 然后用这个区间来计算不知其值的其他积分. 我们用下面的例子来说明这个方法.

例 2.10 考虑标准正态分布的顺序统计量. 当 $N = 7, i_1 = 6$ 及 $i_2 = 7$ 时, 已知

$$M_{6,7}(1,1) = 1.2203041356.$$

(Teichroew (1956)), 由于正态分布关于原点是对称的, 我们取 $B = -A = 4, 4.5, 5, 5.5$, 然后用数值积分的变换法及直接法并取 $n = 28, 657, 46,368, 75,025, 121,393$, 分别对于不同的区间 (A,B) 来计算积分. 误差列于表 2.8 之中, 此处每一个小方格中的第一个数值与第二个数值分别表示变换法与直接法所导致的绝对误

差. 从表 2.8 中我们得到两个结论：(a) $(-4.5, 4.5)$ 是用这两个方法选出的最佳区间；(b) 直接法常常比变换法好些，这与例 2.9 的结论是一致的.

表 2.8　积分区域的比较

n \ (A, B)	$(-4, 4)$	$(-4.5, 4.5)$	$(-5, 5)$	$(-5.5, 5.5)$
28,657	9.45×10^{-4} 1.12×10^{-3}	2.69×10^{-4} 9.50×10^{-5}	5.78×10^{-4} 3.30×10^{-4}	7.56×10^{-4} 6.28×10^{-4}
46,368	1.03×10^{-3} 1.13×10^{-3}	1.19×10^{-4} 1.50×10^{-5}	3.60×10^{-4} 2.72×10^{-4}	4.75×10^{-4} 4.01×10^{-4}
75,025	1.08×10^{-3} 1.15×10^{-3}	2.90×10^{-5} 4.40×10^{-5}	2.25×10^{-4} 1.69×10^{-4}	3.04×10^{-4} 2.55×10^{-4}
121,393	1.23×10^{-3} 1.15×10^{-3}	4.00×10^{-5} 8.40×10^{-5}	1.41×10^{-4} 1.06×10^{-4}	1.89×10^{-4} 1.65×10^{-4}

在绝大多数情况下，关于最好的 (A, B) 的寻求，我们尚无办法，特别对于计算高阶矩. 如何去决定 (A, B) 呢？现在我们可以用一些恒等式，如

$$M_{i_1,\cdots,i_s}(1,\cdots,1) = (-1)^s M_{N-i_s+1,\cdots,N-i_1+1}(1,\cdots,1). \qquad (2.5.9)$$

$M_{i_1,\cdots,i_s}(1,\cdots,1) = 0$, 若 N 与 s 为奇数及 $i_j = s+1-i_{s+1-j}, j = 1,\cdots,\frac{s+1}{2}$. 对于更多的恒等式，我们征引 David (1981), Patel, Kapadia 与 Owen (1976). 现在我们选择一个区间 (A, B) 来近似计算 (2.5.9) 的每一边，而用它们的差作为误差估计的度量. 然后在这些区间中找出一个最好的 $(A_{i_0} B_{i_0})$ 来. 除此而外，我们可以利用这些恒等式找出用于数值积分的 N (张金廷 (1990)). 张金廷给出标准正态分布的顺序统计量的各种混合矩，例如，对于 $N = 10$

$$E(X_{(1)}X_{(2)}X_{(3)}) \cong -1.468,$$
$$E(X_{(1)}X_{(2)}X_{(6)}) \cong 0.041,$$
$$E(X_{(7)}X_{(8)}X_{(9)}) \cong 0.509.$$

§ 2.6 单纯形 T_s 上的分布

由 Aitchison (1986) 的定义，任何矢量 $\boldsymbol{x} \in T_s$，皆称为一个配方，此处 T_s 由 (1.4.8) 定义. 这种类型的数据在许多不同的领域中出现过，例如岩石的地质化学配方，不同深度的沉积物，工业产品等. 为了研究配方数据，我们需要单纯形 T_s 上的各种分布，它们称为 **配方分布** (方开泰，Kotz 与吴启宏 (1992)). 在 T_s 上最著名与重要的分布为 **Dirichlet 分布**.

2.6.1 Dirichlet 分布

若随机变数 Y 有 p.d.f.

$$\lambda^\beta(\Gamma(\beta))^{-1}y^{\beta-1}e^{-\lambda y}, \qquad y>0, \tag{2.6.1}$$

则称 Y 有一个 **伽玛** (gamma) **分布**, 并记之为 $Y \sim G_a(\beta,\lambda)$.

当 $\lambda=1, G_a(\beta,1)$ 称为标准伽玛分布；当 $\beta=n/2$ 及 $\lambda=1/2, G_a(n/2,1/2)$ 化为卡方分布 χ_n^2. 当 $\beta=1$, 则 $G_a(1,\lambda)$ 正好是指数分布，其 p.d.f. 为

$$p(x)=\begin{cases}\lambda e^{-\lambda x}, & 若 \ x>0,\\ 0, & 其他情形.\end{cases} \tag{2.6.2}$$

定义 2.3 命 $X_1,\cdots,X_s$ 为独立的随机变数及 $X_i \sim G_a(\alpha_i,\lambda)$, $\alpha_i>0$, $\lambda>0$, $i=1,\cdots,s$. 置

$$Y_i = X_i \Big/ \sum_{j=1}^s X_j, \qquad i=1,\cdots,s. \tag{2.6.3}$$

则称 $(Y_1,\cdots,Y_s)$ 有一个参变数为 $\alpha_1,\cdots,\alpha_s$ 的 **Dirichlet 分布**，并记之为 $(Y_1,\cdots,Y_s)\sim D_s(\alpha_1,\cdots,\alpha_s)$.

下面是 Dirichlet 分布常用的性质，关于更详细的内容，请参看 Johnson 与 Kotz (1972) 及方开泰，Kotz 与吴启宏 (1990) 的书.

(a) 假定 $(Y_1,\cdots,Y_s)\sim D_s(\alpha_1,\cdots,\alpha_s)$. 则 $(Y_1,\cdots,Y_s)\in T_s$, 且 $(Y_1,\cdots,Y_{s-1})$ 有 p.d.f.

$$p(y_1,\cdots,y_{s-1})=\begin{cases}\dfrac{\Gamma(\alpha_1+\cdots+\alpha_s)}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_s)}\prod_{i=1}^{s}y_i^{\alpha_i-1}, & \text{若}\ (y_1,\cdots,y_s)\in T_s,\\ 0, & \text{其他情形}.\end{cases}\tag{2.6.4}$$

因此，$(Y_1,\cdots,Y_s)$ 的分布独立于 λ.

(b) $(Y_1,\cdots,Y_s)\sim D_s(\alpha_1,\cdots,\alpha_s)$ 的矩为

$$E\left(\prod_{j=1}^{s}Y_j^{r_j}\right)=\left(\prod_{j=1}^{s}\alpha_j^{[r_j]}\right)\Big/\alpha^{[r_1,\cdots,r_s]},\tag{2.6.5}$$

此处 $\alpha=\alpha_1+\cdots+\alpha_s$ 及 $x^{[r]}=x(x+1)\cdots(x+r-1)$ 为递增乘积，特别

$$E(Y_j)=\alpha_j/\alpha,\qquad \mathrm{Var}\,(Y_j)=\frac{\alpha_j(\alpha-\alpha_j)}{\alpha^2(\alpha+1)},$$

$$\mathrm{Cov}\,(Y_i,Y_j)=\frac{-\alpha_i\alpha_j}{\alpha^2(\alpha+1)}.$$

(c) 当 $\alpha_1=\cdots=\alpha_s=1$ 时，$D_s(1,\cdots,1)$ 化为均匀分布 $U(T_s)$ 当 $s=2$ 时，$D_2(\alpha_1,\alpha_2)$ 化为贝塔分布 $Be(\alpha_1,\alpha_2)$.

(d) 假定 $\boldsymbol{y}\equiv(Y_1,\cdots,Y_s)\sim D_s(\alpha_1,\cdots,\alpha_s)$. 则 $\boldsymbol{y}$ 有下面的随机表示

$$\boldsymbol{y}\overset{d}{=}\left(\prod_{i=1}^{s-1}B_i,(1-B_1)\prod_{i=2}^{s-1}B_i,\cdots,1-B_{s-1}\right),\tag{2.6.6}$$

此处 $B_1,\cdots,B_{s-1}$ 相互独立且 $B_i \sim Be(\sum_{j=1}^{i}\alpha_j, \alpha_{i+1})$, $i=1,\cdots,s-1$, 或

$$\boldsymbol{y} \stackrel{\mathrm{d}}{=} \left(B_1, B_2(1-B_1), \cdots, B_{s-1}\prod_{i=1}^{s-2}(1-B_i), \prod_{i=1}^{s-1}(1-B_i)\right), \tag{2.6.7}$$

此处 $B_1,\cdots,B_{s-1}$ 相互独立且 $B_i \sim Be(\alpha_i, \sum_{j=i+1}^{s}\alpha_j)$, $i=1,\cdots,s-1$.

2.6.2 可加若吉斯蒂克椭球分布

命

$$T_s^+ = \{\boldsymbol{x} = (x_1,\cdots,x_s) : x_i > 0,\ i=1,\cdots,s,\ x_1,+\cdots+x_s = 1\}. \tag{2.6.8}$$

对于任何 $\boldsymbol{x} \in T_s^+$, 命

$$\boldsymbol{y}_x' = (y_1,\cdots,y_{s-1}) = \left(\log\frac{x_1}{x_s},\cdots,\log\frac{x_{s-1}}{x_s}\right). \tag{2.6.9}$$

这是将 T_s^+ 映射至 R^{s-1} 上的一一对应，其逆变换为

$$\begin{aligned} x_i &= e^{y_i}\Bigg/\left(1+\sum_{j=1}^{s-1}e^{y_j}\right), \qquad i=1,\cdots,s-1, \\ x_s &= 1\Bigg/\left(1+\sum_{j=1}^{s-1}e^{y_j}\right), \end{aligned} \tag{2.6.10}$$

这就是所谓的**若吉斯蒂克变换**.

定义 2.4 如果一个随机矢量 $\boldsymbol{x} \in T_s^+$, 且其相伴矢量 $\boldsymbol{y}_x \sim EC_{s-1}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$, 则称 $\boldsymbol{x}$ 遵从 **可加若吉斯蒂克椭球分布**, 并记之为 $\boldsymbol{x} \sim ALE_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$, 此处 g 称为密度生成元. 特别若 $\boldsymbol{y}_x \sim N_{s-1}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$, 则 $\boldsymbol{x}$ 遵从 **可加若吉斯蒂克正态分布** (Aitchison (1986)), 并记之为 $\boldsymbol{x} \sim ALN_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$.

假定 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)'\sim ALE_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$. 则 $X_1,\cdots,X_{s-1}$ 的密度由下面的表达式给出：

$$(\det\boldsymbol{\Sigma})^{-1/2}\prod_{i=1}^{s}x_i^{-1}g\left[(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})\right]. \tag{2.6.11}$$

因可加若吉斯蒂克椭球分布是由 $\boldsymbol{x}$ 的分量之比来定义的，所以我们可以找到 $E(X_i/X_j)$, $\mathrm{Cov}\,(X_i/X_j,\ X_k/X_l)$, $E(\log\frac{X_i}{X_j})$, $\mathrm{Cov}\,(\log\frac{X_i}{X_j},\log\frac{X_k}{X_l})$ 但不能找到在应用问题中很有用的 $E(X_i)$ 与 $\mathrm{Cov}\,(X_i,X_j)$ 的解析表达式. 若用 §2.4 所介绍的方法，我们将能给出 $\boldsymbol{x}$ 的分量的混合矩的数值计算方法. 为简单计，我们仅考虑 ALN 分布.

因为 $ALN_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的密度函数为

$$(2\pi)^{\frac{-(s-1)}{2}}(\det\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}}\prod_{i=1}^{s}x_i^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})\right\}, \tag{2.6.12}$$

此处 $\boldsymbol{y}_x$ 由 (2.6.9) 定义， $\boldsymbol{x}$ 的阶为 $r_1,\cdots,r_s$ 的混合矩为

$$\begin{aligned}&E(X_1^{r_1}\cdots X_s^{r_s})\\&=(2\pi)^{\frac{-(s-1)}{2}}(\det\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}}\int_{T_s^+}\prod_{i=1}^{s}x_i^{r_i-1}\\&\quad\times\exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})\right\}dv,\end{aligned} \tag{2.6.13}$$

此处 dv 表示 T_s^+ 的体积元素.

在 §2.4, 我们已经介绍了在 T_s 上计算积分的数值方法，从而我们可以用变换法与直接法来求 (2.6.13) 的混合矩的近似值. 见王元与方开泰 (1990a) 的文章.

§ 2.7 在贝叶斯统计中应用

数值积分在**贝叶斯统计**的应用中居于中心作用. 贝叶斯推断过程的完成表现为骗人的简单. 给定似然函数 $l(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$ 和**先验密度** $q(\boldsymbol{\theta})$, 此处 $\boldsymbol{\theta}$ 是参数. 我们可以用贝叶斯定理去获得 $\boldsymbol{\theta}$ 的**后验密度**

$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})=\frac{l(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\theta})}{\int l(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\theta})\,d\boldsymbol{\theta}}. \tag{2.7.1}$$

这是统计推断的基础. 如果我们对 $\boldsymbol{\theta}_{(1)}$ 的边缘密度有兴趣, 此处 $\boldsymbol{\theta}_{(1)}$ 是 $\boldsymbol{\theta}=(\boldsymbol{\theta}'_{(1)},\boldsymbol{\theta}'_{(2)})'$ 的子集, 则简单地关于 $\boldsymbol{\theta}_{(2)}$ 积分即得

$$p(\boldsymbol{\theta}_{(1)}|\boldsymbol{x})=\int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{\theta}_{(2)}. \tag{2.7.2}$$

当 $l(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$ 与 $p(\boldsymbol{\theta})$ 分别属于**指数族** (Patel, Kapadia 与 Owen (1976)) 及其对应的共轭族, 则熟知 $p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})$ 与 $p(\boldsymbol{\theta}_{(1)}|\boldsymbol{x})$ 可以解析地求得. 不管怎样, (2.7.1) 与 (2.7.2) 中的积分必须分析地或数值地求出. 不少数学家建议了处理这一积分问题的许多有效方法 (Reilly (1976), Naylor 与 Smith (1982), Smith 等 (1985) 与 Shaw (1988)). 特别 Shaw 考虑了用 NTM 来处理.

考虑形为

$$I_s(q)=\int_{R^s} q(\boldsymbol{\theta})f(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})\,d\boldsymbol{\theta}. \tag{2.7.3}$$

的积分, Shaw (1988) 建议用下面形式的和

$$\widehat{I}_s(q)=\sum_{i=1}^{n} w_i q(\boldsymbol{\theta}_i)f(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}_i), \tag{2.7.4}$$

来近似估计 $I_s(q)$. 此处 $\{w_i\}$ 与 $\{\boldsymbol{\theta}_i\}$ 分别称为**权**与**节点**. 如何去选取 $\{w_i\}$ 与 $\{\boldsymbol{\theta}_i\}$? Shaw 引进了一个所谓**重要样本分布点**, 它由

$$x_j=c_j[A_jf_j(U_j)-(1-A_j)f_j(1-U_j)+b_j],\qquad j=1,\cdots,s,$$

$$\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_s).$$

隐含地定义，此处 $0 \le A_j \le 1$, f_j 是一个 $(0,1)$ 上的连续函数使 $u \to O^+$ 时， $f_j(u) \to -\infty$, $\mathbf{u} = (U_1, \cdots, U_s) \sim U(C^s)$ 及 b_j, c_j 均为由 f_j 与 A_j 决定的常数. 命 $\{\mathbf{c}_k\}$ 为一个 C^s 上的 NT-net 与 $\{v_j\}$ 为 $\{\mathbf{c}_k\}$ 上的一个离散概率分布. 则对应积分的节点为 $\{\boldsymbol{\theta}_k\}$, 此处 $\boldsymbol{\theta}_k$ 的第 j 个坐标为

$$\theta_{kj} = c_j[A_j f_j(c_{kj}) - (1 - A_j) f_j(1 - c_{kj}) + b_j],$$

其对应的权

$$w_k = v_k \prod_{j=1}^{s} \left[c_j (A_j f_j'(c_{kj}) - (1 - A_j) f_j'(1 - c_{kj})) \right],$$

此处 f_j' 表示 f_j 的导数. 对于所有 i, 经典方法有 $v_i = 1/n$. Shaw 给出运用他的方法的一些例子及有关的讨论. 事实上， Shaw 的工作可以看作是蒙特卡罗方法与数论方法的混合.

Cranley 与 Patterson (1976) 早年的工作有一个类似的想法：考虑积分 (2.1.1). 当可能构造求积公式族 $R(f,q)$ 时，该族由参数 q 来指标化并有类似的积分法性质，则称求积公式 $R(f)$ 可以随机化. 当 q 从一个分布中被抽样时，没有理由认为该族中对于任意被积函数来说这个元素比另一元素精密些，则这一求积公式集合被称为 **求积公式的随机族**. 每一族中的公式并不必需有同被选中的机会. 假定 $q \sim G(u)$. 则

$$I = \int R(f,q)\, dG(q).$$

Cranley 与 Patterson (1976) 考虑了 q 为 C^t 上的均匀分布并运用 *glp* 集合. 他们建议用 *glp* 集合及一个固定的但又是对 q 的随机矢量的混合. 他们还给出了一些数值例子及详细讨论. 显然他们的方法可以用于贝叶斯统计量.

当维数 s 较大或为无穷时， Bouleau (1990) 建议了一个基于点的 Bernoulli 位移算子，所以他的工作可以用来计算随机过程的一个函数的期望.

熟知 **Gibbs 样本**在贝叶斯统计中具有重要作用. 这一方法给出生成一个后验蒙特卡罗样本 (Gelfand 等 (1990), Müller (1992)). 如何将 NTM 与 Gibbs 样本结合起来去找出一个生成后验分布的较有效程序是一个公开的问题.

习题

2.1 用经典方法 (累次 Simpson 方法或累次梯形方法), 蒙特卡罗方法及 NTM (*glp* 集合) 来计算积分

$$\iint\limits_{x^2+y^2\le 1} dx\,dy$$

并与积分真值 π 来比较三种方法所得的结果.

2.2 用经典方法，蒙特卡罗方法与 NTM 来计算积分

$$\iiint\limits_{x^2+y^2+z^2\le 1} dx\,dy\,dz$$

并与积分真值 $4\pi/3$ 来比较三种方法所得的结果.

2.3 用不同的 NT-nets 来计算下列积分

$$\text{(a) } I_1=\int_0^1\int_0^1\int_0^1 x_1x_2x_3\,dx_1\,dx_2\,dx_3,$$

$$\text{(b) } I_2=\int_0^1\int_0^1 \exp\{-x^2-y^2\}\,dx\,dy,$$

$$\text{(c) } I_3=\int_0^1\int_0^1\int_0^1 \exp(x_1x_2x_3)\,dx_1dx_2dx_3,$$

$$\text{(d) } I_4=\int_0^1\int_0^1\int_0^1 \exp(\sin x_1\sin x_2\sin x_3)\,dx_1dx_2dx_3.$$

2.4 用不同的 NT-nets 来计算积分

$$I_i=\int_{C^s} f_i(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x},\qquad 1\le i\le 4,$$

此处 $f_i(i=1,\cdots,4)$ 由 §2.1 给出. 试比较 $s=2,3,4$ 及不同的 NTM.

2.5 给出 $\boldsymbol{x}\sim MPVII_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$ 与 $\boldsymbol{x}\sim MPII_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的 p.d.f.

2.6 类似于 (2.1.13), 给出 $s=3$ 时的对应公式.

2.7 命 $\boldsymbol{x}\sim N_3(\boldsymbol{0},\boldsymbol{R})$, 其中 $\boldsymbol{R}=(\rho_{ij})$. 已知 $\boldsymbol{x}\in R_+^3$ 的定限概率 p 具有形式 (2.3.1). 命

$$D_1=\{(x,y,z):x>0,\ y>0,\ z>0\}=R_+^3,$$

$$D_2=\{(x,y,z):x>0,\ y>0,\ z<0\},$$

$$D_3=\{(x,y,z):x>0,\ y<0,\ z>0\},$$

$$D_4=\{(x,y,z):x>0,\ y<0,\ z<0\},$$

$$D_5=\{(x,y,z):x<0,\ y>0,\ z>0\},$$

$$D_6=\{(x,y,z):x<0,\ y>0,\ z<0\},$$

$$D_7=\{(x,y,z):x<0,\ y<0,\ z>0\},$$

$$D_8=\{(x,y,z):x<0,\ y<0,\ z<0\},$$

(a) 求出 $\boldsymbol{x}\in D_i\,(2\le i\le 8)$ 的定限概率的对应公式.

(b) 用对称化方法求出

$$p_i=\int_{D_i}n_3(\boldsymbol{x};\boldsymbol{0},\boldsymbol{R})\,d\boldsymbol{x},\qquad 1\le i\le 8,$$

的近似值, 此处 $n_3(\boldsymbol{x},\boldsymbol{0},\boldsymbol{R})$ 是 $N_3(\boldsymbol{0},\boldsymbol{R})$ 的 p.d.f.

2.8 命 $p(\boldsymbol{x})$ 为 $Mt_3(2,\boldsymbol{0},\boldsymbol{R})$ 的 p.d.f. 其中 $\rho_{12}=\rho_{13}=\rho_{23}=1/2$. 由被积函数对称化方法求出

$$q_i=\int_{D_i}p(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x},\qquad 1\le i\le 8,$$

的近似值, 此处 D_i 由习题 2.7 给出. 试比较诸 p_i 与 q_i, 其中诸 p_i 由习题 2.7 给出.

2.9 命 $\boldsymbol{u}\sim(U_1,\cdots,U_s)'\sim U(U_s)$, 后者表示球面 U_s 上的均匀分布. 当 $s=3,4,5$ 时, 用变换法与直接法计算 $E(\boldsymbol{u})$ 与 $\mathrm{Cov}(\boldsymbol{u})$, 并给出这两个方法以比较.

2.10 命 $D=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in R^s,\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}'=1\}$ 表示椭球 $\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\le 1\}$ 的表面，此处 $\boldsymbol{A}>0$. 命 $\boldsymbol{u}\sim U(D)$.

(a) 求出 $E(\boldsymbol{u})$ 与 $\mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{u})$ 的公式.

(b) 用变换法与直接法求出 $E(h(\boldsymbol{u}))$ 的公式.

(c) 用变换法与直接法找出 $E(\boldsymbol{u})$ 与 $\mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{u})$ 的近似值.

2.11 命 $F(x)$ 为标准指数分布及 $X_{(1)}\le X_{(2)}\le\cdots\le X_{(N)}$ 为它的一个顺序统计量. 当 $N=5$, $i,j=1,\cdots,5$ 时，求出 $E(X_{(i)})$ 与 $\mathrm{Cov}\,(X_{(i)},X_{(j)})$ 的近似值.

2.12 命 $\boldsymbol{y}=(Y_1,Y_2,Y_3)\sim D_3(2,4,6)$.

(a) 给出 $E(\boldsymbol{y})$ 与 $\mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{y})$ 的真值.

(b) 用变换法与直接法求出 $E(\boldsymbol{y})$ 与 $\mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{y})$ 的近似值.

2.13 命 $\boldsymbol{x}\sim ALN_3(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_3)$. 用变换法与直接法求出 $\mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{x})$ 的近似值.

2.14 如果一个随机变数 B 有密度

$$\frac{1}{B(\alpha,\beta)}b^{\alpha-1}(1+b)^{-(\alpha+\beta)},\qquad b>0,$$

则称它为有参数 α 与 β 的贝塔 II 型分布并记之为 $B\sim$ BeII (α,β). 命 $B^*\sim$ Be (α,β).

(a) 求出 B 与 B^* 间的关系.

(b) 已知 Be (1, 1) 是均匀分布 $U(0,1)$. 试问 Be II (1, 1) 的 p.d.f. 是什么？试由 (a) 直接求出 Be II (1, 1) 的 p.d.f.

2.15 基于上述习题给出你自己关于不同技术 (经典方法，蒙特卡罗方法与 NTM) 的评价，并给出数值积分中不同的 NTM 的评价.

第三章 最优化及其在统计中的应用

令 D 是 R^s 中的一个有界闭区域，$f(\boldsymbol{x})$ 为 D 上一个连续函数．欲求 $\boldsymbol{x}^* \in D$ 及 M 使得

$$M = f(\boldsymbol{x}^*) = \max_{\boldsymbol{x} \in D} f(\boldsymbol{x}).$$

当 D 为 R^s 中 s 维矩形之情形，我们将介绍一个称之为 SNTO 的算法，这是一个序贯算法用于求 $\boldsymbol{x}^*$ 和 M 的近似值．然后，我们将应用 SNTO 及 SNTO 的推广 RSNTO 到稳健回归、非线性回归、参数的极大似然估计和似然比统计量．本章还介绍应用于非矩形区域的 SNTO 的翻版，并将它应用于许多问题之中．

§ 3.1 最优化的一个数论方法

令 $D = [\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 是 R^s 的一个矩形，即 $a_i \le x_i \le b_i$，$i = 1, \cdots, s$，$f(\boldsymbol{x})$ 是定义在 D 上的一个连续函数．我们欲求 $\boldsymbol{x}^*$ 和 M 使得

$$M = f(\boldsymbol{x}^*) = \max_{\boldsymbol{x} \in D} f(\boldsymbol{x}). \tag{3.1.1}$$

M 称为 $f(\boldsymbol{x})$ 在 D 上的**全局极大**，$\boldsymbol{x}^*$ 称为 $f(\boldsymbol{x})$ 在 D 上的**极大值点**．有许多数值方法可以解决这个问题，例如**单纯形下山法**、**牛顿-高斯法**、**拟牛顿法**、**最速下降法**、**共轭梯度法**，以及**有限制的梯度法** (Dixon (1972), Wolfe (1969), Dixon 和 Szegö (1975), Avriel (1976), Dennis 和 Moré (1977), Nash 和 Walker-Smith (1987), 邓乃扬 (1988), Fletcher (1987), Gill, Murray 和 Wright (1981))．但是，这些方法的大部分要求函数 $f(\boldsymbol{x})$ 是单峰的，和 (或) 可微的，以保证能捕获全局极大值；否则，可能只求得一个**局部极大值**．此外，若在求极大值过程中有如下运算："max"，"min"，$|\boldsymbol{x}|$，或

若 $f(\boldsymbol{x})$ 为分片函数，即

$$f(\boldsymbol{x})=\begin{cases} f_1(\boldsymbol{x}), \text{若} & \boldsymbol{x}\in D_1, \\ \cdots & \\ f_m(\boldsymbol{x}), \text{若} & \boldsymbol{x}\in D_m, \end{cases} \qquad D_1\cup\cdots\cup D_m=D,$$

这时在每个 D_i 的边界上要么不存在微商或难以求得微商，这些方法的使用将面临困难． Horst 与 Tuy (1990) 说："伴随着电脑技术的快速发展，大量实际应用需要我们求解全局极值问题．这些问题在若干年前被认为是计算上无法进行的" Horst 与 Tuy (1990) 的书中收集了处理大量全局极值问题的各种不同程序．另一方面，在过去 20 年中，大量工作是与蒙特卡罗模拟有关．但愈来愈明显，蒙特卡罗优化 (Rubinstein (1986)) 和 **模拟退火算法** (Bertsimas 和 Tsitsiklis (1993)) 等研究得到越来越多的注视．后者是基于随机迭代的求全局极值算法． Ferrari 等 (1993) 说："退火算法是求全局极值的很有名的方法，它的收敛性已被认真研究过， ……，它被用于不少不能用其他方法解决的困难问题．这个方法最大的缺点为其收敛速度非常慢"．

本章我们将讨论 NTM 在全局极值问题上的应用，特别在统计上的应用． NTM 最优化对于其他最优化方法也是一个很强的挑战．

NTM 最优的思想如下：在 D 上取一个 NT-net $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$．因为 $f(\boldsymbol{x})$ 连续， D 是闭有界的，我们能够期望当 n 大时在 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 中有一个点 $\boldsymbol{x}_n^*$ 使得 $f(\boldsymbol{x}_n^*)$ 接近于 M, $\boldsymbol{x}_n^*$ 接近于 $\boldsymbol{x}^*$. 今用 $\boldsymbol{x}_n^*\in\{\boldsymbol{x}_k\}$ 表示满足

$$M_n=f(\boldsymbol{x}_n^*)=\max_{1\leq k\leq n} f(\boldsymbol{x}_k) \tag{3.1.2}$$

的点，本节我们将给出当 $n\to\infty$ 时， $M_n\to M$ 收敛速度的估计．

由假定， $f(\boldsymbol{x})$ 在 D 上一致连续．因此，对任意给定的 $\varepsilon>0$, 存在 $\delta>0$, 使得对任意的 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\in D$, $d(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)<\delta$ 都有

$|f(\boldsymbol{x}_1)-f(\boldsymbol{x}_2)|<\varepsilon$, 其中 $d(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)$ 表示 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 之间的欧氏距离. 集合 $\mathcal{P}$ 的散度已在 §1.4 中定义为

$$DP(\mathcal{P},D)=\max_{\boldsymbol{x}\in D}\min_{1\le k\le n} d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_k).$$

因此, 若 $DP(\mathcal{P},D)<\delta$, 则有

$$|f(\boldsymbol{x}_n^*)-f(\boldsymbol{x}^*)|<\varepsilon,$$

从而

$$M_n\le M\le M_n+\varepsilon. \tag{3.1.3}$$

因此, 若我们能指出存在一个 NT-net 序列 $\{\mathcal{P}_{n_i}\}(n_1<n_2<\cdots)$ 使得当 $i\to\infty$ 时 $DP\to 0$, 则序列 $\{M_{n_i}\}$ 收敛. 定理 1.5 提供了估计 $DP(\mathcal{P},D)$ 的上界, 从而可得结论 $DP(\mathcal{P}_{n_i},D)\to 0$ $(i\to\infty)$. 更加精确地我们将证明 $DP(\mathcal{P}_{n_i},D)=O(n_i^{-1/s}\log n_i)(i\to\infty)$ 对某些 NT-net 成立. 为了证明定理 1.5, 我们需要下面的引理.

引理 3.1 设 $\boldsymbol{y}\in C^s$, $r\le\sqrt{s}$. 记 $B(\boldsymbol{y},r)$ 为中心为 $\boldsymbol{y}$, 半径为 r 的 s 维球体, 则我们能在 $B(\boldsymbol{y},r)\cap C^s$ 中放进一个边长为 $r/\sqrt{s}$ 的立方体.

证 首先我们造一个 s 维的立方体 C_0 其中心为 $\boldsymbol{y}$, 边长为 $2r/\sqrt{s}$. 然后考虑矩形 $C_0\cap C^s$. 这个矩形的每个边是一个一维的区间, 具有表达式, $I=[t-r/\sqrt{s},t+r/\sqrt{s}]\cap[0,1]$ 其中 $t\in[0,1]$. 若 $t+r/\sqrt{s}\le 1$, 则 I 含有长度为 $r/\sqrt{s}$ 的区间 $[t,t+r/\sqrt{s}]$. 否则 I 含有长度为 $r/\sqrt{s}$ 的区间 $[1-r/\sqrt{s},1]$. 总之, $C_0\cap C^s$ 含有一个边长为 $r/\sqrt{s}$ 的立方体 C^*, 从而 $B(\boldsymbol{y},r)\cap C^s$ 包含 C^*, 引理证毕.

定理 1.5 的证明 可以假定 $DP(\mathcal{P},D)>0$, 及存在 $\boldsymbol{x}\in D$ 满足

$$\min_{1\le k\le n} d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_k)=DP(\mathcal{P},D).$$

因此, 对任意的 ε 满足 $0<\varepsilon<DP(\mathcal{P},D)$, 球体 $B(\boldsymbol{x},DP(\mathcal{P},D)-\varepsilon)$ 不包含 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 中任何点. 由引理 3.1, 我们能在 $B(\boldsymbol{x}, DP(\mathcal{P},$

$D)-\varepsilon)\cap C^s$ 中放进一个边长为 $(DP(\mathcal{P},D)-\varepsilon)/\sqrt{s}$ 的立方体.因此，由 (1.4.3) 我们有

$$2D(n)^{1/s}\geq D^*(n)^{1/s}\geq\left|\frac{N(C^*,\mathcal{P})}{n}-v(C^*)\right|^{1/s}$$
$$=v(C^*)^{1/s}=\frac{DP(P,D)-\varepsilon}{\sqrt{s}}.$$

定理证毕. □

定理 3.1 设 $f(\boldsymbol{x})$ 为定义在一个有界闭区域 D 上的连续函数，设 $\{\mathcal{P}_{n_i}\}(n_1<n_2<\cdots)$ 是 D 上的一个点集序列，它有 F 偏差或伪 F 偏差 d_{n_i} 使得 $d_{n_i}=o(1)$, $i\to\infty$. 令点 $\boldsymbol{x}^*_{n_i}\in\mathcal{P}_{n_i}$ 满足

$$M_{n_i}=f(\boldsymbol{x}^*_{n_i})=\max\nolimits_{1\leq k\leq n_i}f(\boldsymbol{x}_k^{(n_i)}).$$

则当 $i\to\infty$ 时 $M_{n_i}\to M$.

我们很难给出使 (3.1.3) 成立的 ε 和 δ 之间的量的关系，因为 δ 依赖于 ε, $f(\boldsymbol{x})$ 和 D. 但是我们有下面的定理.

定理 3.2 设 $\nabla f=(\frac{\partial f}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_s})$ 在 D 上连续，且

$$\|\nabla f\|=\left(\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2\right)^{1/2}<C$$

在 D 上成立，则

$$M_n\leq M\leq M_n+CDP(\mathcal{P},D). \tag{3.1.4}$$

证. 由中值定理有

$$f(\boldsymbol{x}^*)-f(\boldsymbol{x}_i)=\nabla f|_{\boldsymbol{z}}\cdot(\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{x}_i),$$

其中 $\boldsymbol{z}$ 位于 $\boldsymbol{x}^*$ 和 $\boldsymbol{x}_i$ 的连线上. 由许瓦尔兹不等式有

$$\begin{aligned}|f(\boldsymbol{x}^*)-f(\boldsymbol{x}_i)|&\leq\|\nabla f\|d(\boldsymbol{x}^*,\boldsymbol{x}_i)\\&\leq Cd(\boldsymbol{x}^*,\boldsymbol{x}_i)\\&\leq CDP(\mathcal{P},D),\end{aligned} \tag{3.1.5}$$

以及

$$M_n \leq M \leq M_n + CDP(\mathcal{P}, D).$$

定理证毕. □

由定理 3.2 和 1.5 得

$$M_n \leq M \leq M_n + 2s^{1/2}CD(n, \mathcal{P})^{1/s}. \tag{3.1.6}$$

有关散度和它的性质可参见 Niederreiter (1983, 1992).

例 3.1 考虑函数

$$f(x, y) = 2e^{-\frac{1}{2}(x^2+(y-4)^2)} + e^{-\frac{1}{2}((x-4)^2+\frac{y^2}{4})} + e^{-\frac{1}{2}(\frac{(x+4)^2}{4}+y^2)}, \tag{3.1.7}$$

其中 $(x, y) \in R^2$. 试求 $f(x, y)$ 在 R^2 上的全局极大值和极大值点.

利用软件(例如 **MATLAB**) 可以画出 f 的等高线图(图 3.1), 从中能看到它有三个极大值点 (0,4), (4, 0) 和 (-4, 0), 且 (0,4) 是全局极大值点, 即 $\boldsymbol{x}^* = (0, 4)$, $M = f(\boldsymbol{x}^*) = f(0, 4) \cong 2.000091$. 若用牛顿 - 高斯型算法, 如初始点选取不当, 则可能只求得另两个局部极大值 $f(4, 0) \cong 1.0000003$ 或 $f(-4, 0) \cong 1.00000001$.

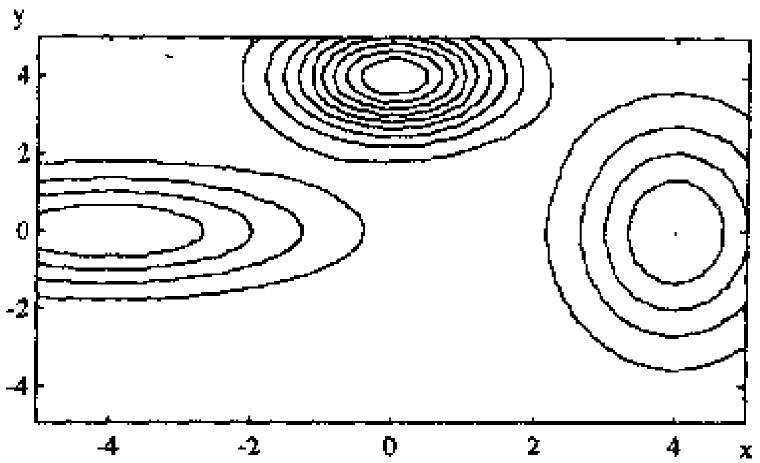


图 3.1 $f(x, y)$ 的等高线图

现在我们来利用 NTM 来求 M 和 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似值. 我们知道函数 $f(x, y)$ 在矩形 $D = [-10, 7] \times [-6, 7]$ 之外的值接近于零,

因此我们可限制定义域为 D. 利用 Fibonacci 序列来产生 glp 集 (习题 1.10), 其结果列于表 3.1. 由表 3.1 我们有如下的看法:

表 3.1 NTM 作优化计算

n	M_n	x_n^*	y_n^*
233	1.876053	0.3240347	3.847639
377	1.848486	0.3938990	3.948276
610	1.947677	−0.1483603	4.176230
987	1.944570	0.1018238	4.214286
1,597	1.988365	−0.1055107	4.024734
2,584	1.982186	0.1282892	4.039280
4,181	1.991075	−0.0890932	3.966874
6,765	1.993981	0.0222206	4.078123
10,946	1.996928	0.0554085	4.010095
17,711	1.999915	0.0040932	3.987268
28,657	1.999322	−0.0276194	4.001658
46,368	1.998314	0.0382052	4.017889
75,025	1.999495	−0.0065374	4.023386

(a) 所有的 $\boldsymbol{x}_n^* = (x_n^*, y_n^*)$ 都接近于全局极大值 $\boldsymbol{x}^* = (0, 4)$, 这是利用 NTM 来求函数全局极大值和极大值点的最大优点

(b) 当 n 增加时, 一般 $|M_n - M|$ 下降. 当 $n = 610$ 时其相对误差

$$|M_n - M|/M$$

为 2.62%; 当 $n = 1597$ 时, 相对误差降为 0.586%.

(c) 若 $n_1 > n_2$, 可能会出现 $M_{n_1} < M_{n_2}$, 因为对不同的 n, 相应的 glp 集之间可能没有一个点是相同的. 但当 $n_1 >> n_2$ 时, 一般有 $M_{n_1} > M_{n_2}$.

(d) M_n 收敛到 M 的速度不很快, (x_n^*, y_n^*) 收敛到 $\boldsymbol{x}^* = (0, 4)$ 的速度就更慢.

为了避免在 (c) 中所述的, 利用有限的 NT-net 作优化计算的缺点, 我们建议用无限的 NT-net. 设 $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots\}$ 是 D 上的

一个无限 NT-net, 令

$$\begin{aligned} M_1 &= f(\boldsymbol{x}_1), \\ M_{k+1} &= \max\left(M_k,\ f(\boldsymbol{x}_{k+1})\right) \quad k = 1, 2, \cdots. \end{aligned} \tag{3.1.8}$$

经过 n (n 较大) 步后，我们可以期望 M_n 接近于极大值 M. 这时当 n 增加时，M_n 总是非降的. 上述两个基于 NTM 的方法称为 **NTM 搜索法**. 我们将在下个例子对 NTM 搜索法作一比较，其中优化结果是用有限与无限 NT-net 获得的.

例 3.2 令

$$f(x, y, z, u) = \exp(xyzu)\sin(x + y + z + u),$$

其中 $(x, y, z, u) \in C^4$. 我们已知 $M = 1.0261986$.

表 3.2 *glp* 集和 *H* 的比较

n	$Mn(glp)$	$Mn(H)$
60	1.022111	1.017213
118	1.015450	1.017213
180	1.019175	1.018451
932	1.024526	1.023790
2129	1.025099	1.024064
3001	1.025076	1.024064
5003	1.025139	1.024889
10,007	1.025569	1.025550
28,117	1.025725	1.026118

表 3.2 分别给出了利用 *glp* 集和 *H* 集的结果，其中在产生 *H* 集时 Niederreiter 和 McCurley (1979) 采用了 $p_1 = 2, p_2 = 3, p_3 = 5$ 和 $p_4 = 11$ (§1.3). 结果表明两个方法几乎有相同的精度，利用后一方法当 n 增加时 M_n 增加，但产生 **H** 集的计算量比产生 *glp* 集要大得多. 更精确地讲，对后者的计算时间比前者的计算时间至少长两倍. 因此，我们倾向于推荐使用 *glp* 集.

§3.2 一个序贯算法 (SNTO)

在上节我们介绍了如何用 NTM 来解决最优化问题 (3.1.1), 并指出, 在一定的条件下 M_n 收敛到 M 的速度是 $O(n^{-1/s}\log n)$. 若精度要求不高, 只要 n 适当地大, 则 M 和 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似值 M_n 和 $\boldsymbol{x}_n^*$ 可以满足要求的精度. 若精度要求较高, n 将会非常之大. 例如, 对于维数 $s=4$ 时令 $a_n=n^{-1/4}\log n$, 我们有下表之数据

表 3.3 $a_n=n^{-1/4}\log n$ 之值

n	10	10^5	10^{10}
a_n	1.4563	0.6474	0.0728
n	10^{20}	10^{30}	10^{40}
a_n	4.605×10^{-4}	2.184×10^{-6}	9.210×10^{-9}

若我们要求 $d(\boldsymbol{x}_n^*,\boldsymbol{x}^*)<10^{-5}$, 则 n 必须大于 10^{20}, 这是太大了! 因此, 我们需要一个方法能降低 n 的数目.

设 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 为 $\boldsymbol{R}^s$ 中的一个矩形, 其体积为 $v([\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}])=\prod_{i=1}^s(b_i-a_i)$, 设 $\{\boldsymbol{y}_k,\ k=1,\cdots,n\}$ 为 C^s 上的一个 NT-net. 令

$$x_{ki}=a_i+(b_i-a_i)y_{ki},\qquad i=1,\cdots,s,$$
$$\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks}),\qquad k=1,\cdots,n.$$

那么 $\{\boldsymbol{x}_k,\ k=1,\cdots,n\}$ 是 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 上的一个 NT-net, 且有

$$\begin{aligned} d(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)&=\left(\sum_{l=1}^s(b_l-a_l)^2(y_{il}-y_{jl})^2\right)^{1/2}\\ &\le\max_{1\le l\le s}|b_l-a_l|\,d(\boldsymbol{y}_i,\boldsymbol{y}_j)\end{aligned}\tag{3.2.1}$$

其散度

$$DP(\{\boldsymbol{x}_i\},[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}])\le\max_{1\le l\le s}(b_l-a_l)DP(\{\boldsymbol{y}_k\},C^s).$$

令 $l(D)$ 表示矩形 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 的最大边长，如果我们能找到一个区域 D^* 使得 $\boldsymbol{x}^* \in D^* \subset D$, 且 $l(D^*) << l(D)$. 那么最优化问题 (3.1.1) 就化为在区域 D^* 上的最优化问题. 因此，同样大小的 NT-net, 若用 D^* 代替 D, 一般会获得更加精确的 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似解. 例如，若取 $s=4$, $D=[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$, $D^*=[\boldsymbol{a}^*,\boldsymbol{b}^*]\subset D$ 且 D^* 的每边长度为 D 相应边的 10^{-1}. 则在 D^* 上用 n 个点获得解的精度，粗略地讲，相当于在 D 上用 $10^4 n$ 点获得的精度. 这一想法是 Niederreiter 与 peart (1986) 及方开泰与王元 (1990) 首先建议与发展的. 进而言之，方开泰和王元 (1990) 提出了一个利用 NT-net 的序贯优化算法，并简称为 SNTO. 现在我们介绍当 D 为矩形 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 时的 SNTO. 今后，我们用 $\max\boldsymbol{a}\,(\min\boldsymbol{a})$ 表示 $\max_{1\le i\le n} a_i\,(\min_{1\le i\le n} a_i)$ 其中 $\boldsymbol{a}=(a_1,\cdots,a_n)$, n 为 $\boldsymbol{a}$ 的维数.

步骤 0 初始: 令 $t=0$, $D^{(0)}=D$, $\boldsymbol{a}^{(0)}=\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}^{(0)}=\boldsymbol{b}$.

步骤 1 产生 NT-net: 用某一数论方法产生 n_t 个点的点集 $\mathcal{P}^{(t)}$ 使其在 $[\boldsymbol{a}^{(t)},\boldsymbol{b}^{(t)}]$ 上均匀散布.

步骤 2 计算新的近似值: 求 $\boldsymbol{x}^{(t)} \in \mathcal{P}^{(t)} \cup \{\boldsymbol{x}^{(t-1)}\}$ 和 $M^{(t)}$ 使得

$$M^{(t)} = f(\boldsymbol{x}^{(t)}) \ge f(\boldsymbol{y}), \quad \forall \boldsymbol{y} \in \mathcal{P}^{(t)} \cup \{\boldsymbol{x}^{(t-1)}\}, \tag{3.2.2}$$

此处 $\boldsymbol{x}^{(-1)}=\{\phi\}$ 为空集， $\boldsymbol{x}^{(t)}$ 和 $M^{(t)}$ 是当前 $\boldsymbol{x}^*$ 和 M 的最好的近似值.

步骤 3 停止准则: 令 $\boldsymbol{c}^{(t)}=(\boldsymbol{b}^{(t)}-\boldsymbol{a}^{(t)})/2$. 若 $\max\boldsymbol{c}^{(t)}<\delta$, 这里 δ 为预先给定的小正数，则 $D^{(t)}$ 已足够小， $x^{(t)}$ 和 $M^{(t)}$ 被接受为近似解，并停止. 若 $\max\boldsymbol{c}^{(t)}\ge\delta$, 进入下一步.

步骤 4 收缩区域: 定义一个新的区域 $D^{(t+1)}=[\boldsymbol{a}^{(t+1)}, \boldsymbol{b}^{(t+1)}]$ 如下:

$$\begin{aligned} a_i^{(t+1)} &= \max(x_i^{(t)}-\gamma c_i^{(t)}, a_i) \\ b_i^{(t+1)} &= \min(x_i^{(t)}+\gamma c_i^{(t)}, b_i) \end{aligned} \qquad i=1,\cdots,s,$$

其中 γ 为预先定义的收缩比. 令 $t=t+1$ 回到步骤 1.

根据我们的经验, 建议取 $n_1>n_2=n_3=\cdots$ 收缩比常取 0.5, Niederreiter 与 Peart (1986) 建议用 $r_i=r^i$ 作为第 i 次收缩比, 其中 $r>0$ 为一个常数.

图 3.2 显示了 SNTO 的收缩步骤, 图中 $D^{(t)}$ 的每个边长为 $D^{(t-1)}$ 相应边长的二分之一. 若 $\boldsymbol{x}^{(t)}$ 很接近于 D 的边界, 如图 3.2 中的 $\boldsymbol{x}^{(1)}$, 则 $D^{(t)}$ 要求被 D 所包含, 所以 $D^{(t)}$ 的边长可以缩小少于 $D^{(t-1)}$ 边长的 $\frac{1}{2}$ 倍. 注意并不需要 $D^{(t+1)}\subset D^{(t)} (t>1)$ 恒成立, 例如 $D^{(3)}\subset D$, 但 $D^{(3)}\not\subset D^{(2)}$.

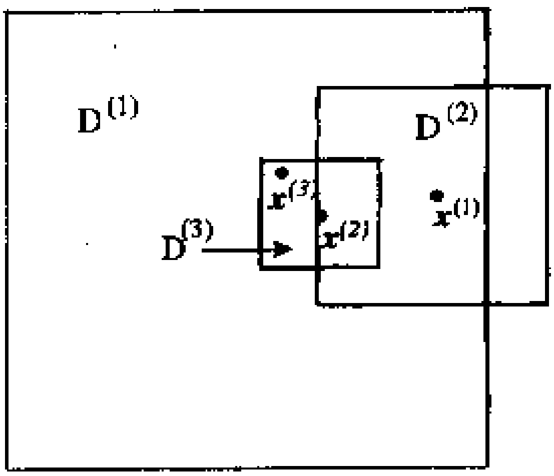


图 3.2 SNTO

另一种收缩区域的方法是选取 $D^{(t+1)}=[\boldsymbol{a}^{(t+1)},\boldsymbol{b}^{(t+1)}]$, 是包有最大函数值及 $D^{(t)}$ 中 ρn_t 个点的最小矩形, 其中 ρ 为预先确定的数, 例如 $\rho=0.2$.

例 3.2 (继续) 现在我们用 SNTO 去寻找 $f(\boldsymbol{x})$ 在 C^4 的极大值和极大值点. 取 $n_1=1142$, $n_2=n_3=\cdots=118$. 表 3.4 给出了 $M^{(t)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(t)}$, $1\le t\le 10$ 的结果, 我们看到仅用了 2204 个点, $M^{(10)}$ 的精度已达到 10^{-7}. 若我们用上节的方法, 即使用 10^5 个点, 其精度远远低于 10^{-7}.

附注 3.1 由表 3.4 看出 $M^{(1)}=M^{(2)}$, 这个现象也常常发生在其它例子中. 这表明在 SNTO 中我们不能利用在数值分析

中常常使用的停止规则： $M^{(t+1)} - M^{(t)} \le \varepsilon.$

表 3.4　用 SNTO 计算 M 与 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似值

n_t	$M^{(t)}$	$x_1^{(t)}$	$x_2^{(t)}$	$x_3^{(t)}$	$x_4^{(t)}$
1142	1.0242500	0.5153240	0.3638354	0.4470228	0.3183012
118	1.0242500	0.5153240	0.3628354	0.4470228	0.3183012
118	1.0256555	0.4274003	0.4242167	0.3463872	0.4252928
118	1.0259550	0.4141587	0.3823739	0.3998829	0.4512461
118	1.0261160	0.4271354	0.4017061	0.3980291	0.4207906
118	1.0261934	0.4127022	0.4097835	0.4039878	0.4113892
118	1.0261961	0.4113117	0.4093200	0.4056430	0.4127795
118	1.0261983	0.4106828	0.4102800	0.4091189	0.4091050
118	1.0261984	0.4109311	0.4091710	0.4099299	0.4091878
118	1.0261986	0.4104594	0.4096097	0.4099382	0.4094940
2004					

例 3.3　函数

$$f(x,y,z,u) = -\left(x-\frac{3}{11}\right)^2 - \left(y-\frac{6}{13}\right)^2 - \left(z-\frac{12}{23}\right)^4 - \left(u-\frac{8}{37}\right)^6$$

在 C^4 上的极大值为 $M=0$, 其极大值点为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^* &= \left(\frac{3}{11},\frac{6}{13},\frac{12}{23},\frac{8}{37}\right)\\ &\cong (0.272727, 0.4615384, 0.521739, 0.216216).\end{aligned}$$

表 3.5 给出了 SNTO 和 §3.1 非序贯 NTM 算法的比较，从中看出 SNTO 是特别有效的. 由表 3.5 我们看到 $M^{(13)}$ 已十分接近 $M=0$, 但 $\boldsymbol{x}^{(13)} = (0.2727148, 0.4615162, 0.4907019, 0.2213063)$ 并不非常接近于 $\boldsymbol{x}^*$. 产生这个现象的原因是，当区域收缩到一定程度时， $\boldsymbol{x}^*$ 可能落到搜索区域之外，例如本例 $\boldsymbol{x}^*$ 就不属于 $D^{(13)}$. 为了提高 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似解的精度，我们对 SNTO 作如下之调整.

表 3.5　SNTO 与 NTM 搜索法之比较

n	$Mn(H)$	n_t	$M^{(t)}$
1	−.0788052	1142	-4.133×10^{-4}
2	−.0428139	118	-4.133×10^{-4}
4	−.0301196	118	-2.299×10^{-4}
22	−.0210772	118	-2.863×10^{-5}
28	−.0163983	118	-2.863×10^{-5}
58	−.0078911	118	-5.478×10^{-6}
316	−.0032230	118	-2.202×10^{-6}
1282	−.0027283	118	-1.593×10^{-6}
1666	−.0026824	118	-1.262×10^{-6}
2002	−.0008884	118	-1.033×10^{-6}
5602	−.0006499	118	-9.940×10^{-7}
9346	−.0006242	118	-9.466×10^{-7}
		118	-9.286×10^{-7}
		2558	

首先我们运用 SNTO 求得一个近似解 $\boldsymbol{x}^{(t)}$, 然后构造一个矩形 $\bar{D}^{(1)}=[\bar{\boldsymbol{a}}^{(1)},\bar{\boldsymbol{b}}^{(1)}]$, 其中心为 $\boldsymbol{x}^{(t)}$, 边长为 $D=[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 相应边长的 1/4 ~ 1/16. 具体来讲,

$$\bar{\boldsymbol{a}}^{(1)}=(\bar{a}_1^{(1)},\cdots,\bar{a}_s^{(1)}),\qquad \bar{\boldsymbol{b}}^{(1)}=(\bar{b}_1^{(1)},\cdots,\bar{b}_s^{(1)}),$$

其中

$$\left.\begin{aligned}\bar{a}_i^{(1)}&=\max(a_i,x_i^{(t)}-c_i^{(1)}/m),\\ \bar{b}_i^{(1)}&=\min(b_i,x_i^{(t)}+c_i^{(1)}/m),\end{aligned}\right\}\quad i=1,\cdots,s,$$

$4\le m\le 16$, $\boldsymbol{c}^{(1)}=(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a})/2$. 然后在 $\bar{D}^{(1)}$ 上再次运用 SNTO. 类似的方法可定义 $\bar{D}^{(2)}$, 如此下去直至取得满意的结果为止. 我们称这个多次重复使用 SNTO 的算法为 **RSNTO**. 与 RSNTO 类似的想法, 见 Niederreiter (1992). 读者可以试用 RSNTO 来改进例 3.3 之结果.

附注 3.2 若区域收缩的程序中收缩比 $\gamma < \frac{1}{2}$, 收敛的速度可能会增加. 由表 3.4 和 3.5 的结果表明区域收缩的第一步采用收缩比为四分之一是可能的, 如果函数比较平坦, 甚至可用收缩比为十分之一. 但是, 如果区域收缩得太快, 则 $\boldsymbol{x}^*$ 可能会落到某个 $D^{(t)}$ 的外面, 会导致不正确的答案.

在以下几节中, 我们将应用 SNTO 和 RSNTO 来处理统计中的一些问题.

§ 3.3 极大似然估计

在分布参数的估计理论中, 极大似然法被视为最有效的方法之一. 令 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 是来自总体有分布密度 $g(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})$ 的一个样本, 其中 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \cdots, \theta_s)$ 为参数, $\boldsymbol{\theta} \in D$, D 为参数空间. $\boldsymbol{\theta}$ 的 **极大似然估计** (MLE) $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 使 **似然函数**

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{N} g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}), \tag{3.3.1}$$

达极大, 即

$$L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \max_{\boldsymbol{\theta} \in D} L(\boldsymbol{\theta}); \tag{3.3.2}$$

或等价地, MLE 使 **对数似然函数**

$$l(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \log g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}), \tag{3.3.3}$$

达极大, 即

$$l(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \max_{\boldsymbol{\theta} \in D} l(\boldsymbol{\theta}). \tag{3.3.4}$$

只有少数的分布, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 有解析表达. 大部分情形我们必须用数值算法来求得 MLE $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. 人们常用 **Newton-Raphson 法** 和该法的推广来求 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的近似值. 但这些方法并不永远奏效. 傅全 (1989) 研究解参数估计中的非线性方程组用 Newton-Raphson 方法的效

力，他从哥西分布中产生 1000 个样本，结果其中有 43 个样本 Newton-Raphson 方法因不收敛而失败，有 79 样本只求得局部极大值. 产生这些现象的原因是初始值选取不当. 当参数的数目增加时，情形将更加严重，例如对三参数威布尔分布和贝塔分布的极大似然估计就存在这个问题，从而许多人研究如何求它们的极大似然估计： Cohen (1965), Dubey (1967), Gnanadesikan, Pinkham 和 Hughes (1967), Harter 和 Moore (1965), Menon (1963), Sirvanci 和 Yang (1984) 和 Wingo (1972).

但是，求满足 (3.3.2) 或 (3.3.4) 的 MLE $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 是最优化问题 (3.1.1) 的一个特例，我们自然可以用 SNTO 来求 MLE. 在大部分场合，参数空间 D 很大，甚至无限大，因此不可能用这么大的区域 D 作为 SNTO 的初始区域. 因此，方开泰和袁克海 (1990) 建议下面的方法来给出初始区域.

首先，我们求得一组矩估计 $\boldsymbol{\theta}^* = (\theta_1^*, \cdots, \theta_s^*)$. 对大部分常见分布，矩估计并不难求得，并且它离开 $\boldsymbol{\theta}$ 的 MLE 不会太远. 其次，选择一组正常数 $c_1, \cdots, c_s$, 它们的选取依赖于母体分布和样本大小，一般来讲，样本大小大时，$\{c_i\}$ 应当较小，样本大小小时，$\{c_i\}$ 应较大. 于是矩形

$$D = [\theta_1^* - c_1, \theta_1^* + c_1] \times [\theta_2^* - c_2, \theta_2^* + c_2] \times \cdots \times [\theta_s^* - c_s, \theta_s^* + c_s]$$

便选为 SNTO 的初始区域.

现在我们应用上面的方法到威布尔和贝塔分布的极大似然估计.

威布尔分布的分布密度为

$$g(x; \gamma, \beta, \alpha) = \frac{\alpha}{\beta^\alpha}(x-\gamma)^{\alpha-1}\exp\{-[(x-\gamma)/\beta]^\alpha\}. \tag{3.3.5}$$

其中 γ 为位置参数，β 为尺度参数，α 为形状参数. 它的似然函数和对数似然函数分别为

$$L(\gamma, \beta, \alpha) = \prod_{i=1}^N g(x_i; \gamma, \beta, \alpha), \tag{3.3.6}$$

和

$$l(\gamma,\beta,\alpha)=N(\log\alpha-\alpha\log\beta)+(\alpha-1)\sum_{i=1}^{N}\log(x_i-\gamma)$$
$$-\frac{1}{\beta^\alpha}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\gamma)^\alpha,$$

令 $\boldsymbol{\theta}=(\gamma,\alpha,\beta)$, D 为参数空间. 显然

$$D=\{(x,y,z):x\in R^1,\ y>0,\ z>0\}.$$

Menon (1963) 和 Dubey (1967) 给出了威布尔分布两种不同的估计，但它们均不是极大似然估计. Cohen (1965), Harter 和 Moore (1965), 和 Wingo (1972) 讨论了如何求威布尔分布的 MLE 的方法. 现在，我们运用 SNTO 来求威布尔分布的 MLE.

首先，我们需要求一组 γ,β 和 α 的矩估计 γ^*, β^* 和 α^* 作为“初始值”. 有好几种方法来求得矩估计，令 $x_1,\cdots,x_N$ 是来自母体的一个样本，下面是常用的一种方法：

γ^* 取为最小的顺序统计量， $\gamma^*=\min(x_1,\cdots,x_N)=x_{(1)}$, α^* 是方程

$$\frac{(\bar{x}-\gamma^*)^2}{\hat{\sigma}^2+(\bar{x}-\gamma^*)^2}=\frac{\Gamma^2(1+1/\alpha^*)}{\Gamma(1+2/\alpha^*)} \tag{3.3.7}$$

的解，其中 $\bar{x}$ 和 $\hat{\sigma}^2$ 分别为样本均值和样本方差. 最后取

$$\beta^*=(\bar{x}-\gamma^*)/\Gamma(1+1/\alpha^*). \tag{3.3.8}$$

c_1, c_2, c_3 的取值依赖于样本大小. 由初始值 $\{c_i\}$ 及初始区域，我们可以对 $D=[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$, 及其收缩区域 $D^{(t)}=[\boldsymbol{a}^{(t)},\boldsymbol{b}^{(t)}]$ 加上如下之条件

$$a_i^{(t)}\geq 0,\quad i=1,2,3;\ b_1^{(1)}<x_{(1)}. \tag{3.3.9}$$

下面我们利用五批来自威布尔分布的数据，它们来自 Menon (1963, 数据 1, 两参数， $\gamma=0$), Smith 和 Dubey (1964, 数据 2), Harter 和 Moore (1965, 数据 3 和 4), Dubey (1967, 数据 5). 除

了数据 1 之外，其余数据均来自三参数威布尔分布. 对所有数据集运用 SNTO 时均取 $\delta = 0.000001$. 表 3.6 至表 3.10 给出利用 SNTO 求得的 MLE, 以及由 Menon (1963), Harter 和 Moore (1965), Cohen (1963) 和 Wingo (1972) 求得之 MLE, 矩估计和这些结果的比较. 每个表的最后一行, n 表示在 SNTO 中所用点的总数, LLMAX 表示函数 l 在相应参数估计的函数值. 这些表的结果表明，在所有的结果中，用 SNTO 求得的是最好的.

表 3.6 数据 1 (Menon)

α	β	LLMAX	方法
1.22039	0.42855	−36.14313	矩估计
1.40000	0.57000	−36.04471	Menon的估计
1.36300	0.50600	−35.67247	Cohen的估计
1.36016	0.50482	−35.67238	SNTO的估计
$c_1 = c_2 = 5$	$n_1 = 987$	$n_2 = 233$	$n = 4249$

表 3.7 数据 2 (Smith 和 Dubey)

γ	α	β	LLMAX	方法
13.00000	1.73433	52.72173		矩估计
11.48075	1.78250	54.30704	−466.40332	Wingo的估计
11.41591	1.80314	54.59485	−466.39307	SNTO的估计
$c_1 = 10$	$c_2 = 5$	$c_3 = 10$	$n_1 = 1459$	$n_2 = 418$, $n = 6893$

表 3.8 数据 3 (Harter 和 Moore)

γ	α	β	LLMAX	方法
15.00000	1.86293	87.47449		矩估计
2.48000	2.19900	101.80000	−206.25839	H-M的估计
2.47865	2.19942	101.79488	−206.25839	Wingo的估计
2.48774	2.19872	101.77040	−206.25826	SNTO的估计
$c_1 = 15$	$c_2 = 5$	$c_3 = 20$	$n_1 = 1459$	$n_2 = 418$, $n = 6475$

表 3.9　数据 4 (Harter和 Moore)

γ	α	β	LLMAX	方法
40.89999	1.97754	72.10414		矩估计
30.80000	2.33000	83.50000	−196.51839	H–M的估计
30.79874	2.32999	83.50906	−196.51833	Wingo的估计
30.78090	2.33005	83.46425	−196.51828	SNTO的估计
c_1 =20	c_2 =5	c_3 =20	n_1 =1459	n_2 =418, n =8565

表 3.10　数据 5 (Dubey)

γ	α	β	LLMAX	方法
0.02723	1.15487	1.05928		矩估计
0.02248	1.20123	1.09158	−98.55104	Wingo的估计
0.02240	1.20163	1.07676	−98.53603	SNTO的估计
c_1 =5	c_2 =5	c_3 =5	n_1 =1459	n_2 =418, n =8565

现在我们讨论贝塔分布的参数估计，贝塔分布的分布密度是

$$f(x;\alpha,\beta)=\frac{1}{B(\alpha,\beta)}x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1},$$
$$0<x<1,\quad \alpha>0,\quad \beta>0 \tag{3.3.10}$$

其参数 $\boldsymbol{\theta}=(\alpha,\beta)$，参数空间 $D=\{(x,y):\ x>0,\ y>0\}$. 其对数似然函数为

$$\begin{aligned}l(\alpha,\beta)=&N[\log\Gamma(\alpha+\beta)-\log\Gamma(\alpha)-\log\Gamma(\beta)]\\&+(\alpha-1)\sum_{i=1}^{N}\log x_i+(\beta-1)\sum_{i=1}^{N}\log(1-x_i).\end{aligned} \tag{3.3.11}$$

参数 α 和 β 的矩估计可以求得如下：

$$\alpha^*=\bar{x}\Big[\frac{\bar{x}(1-\bar{x})}{s^2}-1\Big],$$
$$\beta^*=(1-\bar{x})\Big[\frac{\bar{x}(1-\bar{x})}{s^2}-1\Big],$$

其中 $\bar{x}$ 和 s^2 分别为样本均值和样本方差.

对于贝塔分布的极大似然估计， Gnanadesikan, Pinkham 和 Hughes (1967) 曾进行了详细讨论，并给出一些数值例子，这些数据组成了我们的数据 6 和 7. 我们利用 SNTO 来求 α 和 β 的 MLE, 取 $\delta = .000001$, $c_1 = 5$ $c_2 = 10$. 表 3.11 和表 3.12 给出了 SNTO 的估计和 Gnanadesikan 的结果的比较.

表 3.11　数据 6 (Gnanadesikan)

α	β	LLMAX	方法
1.65405	11.81971		矩估计
1.79300	12.78100	24.31381	Gnanadesikan的估计
1.79511	12.79744	24.31425	SNTO的估计
c_1 =5	c_2 =10	n_1 =987	n_2 =233, n =4016

表 3.12　数据 7 (Gnanadesikan)

α	β	LLMAX	方法
6.18149	10.50741		矩估计
6.54300	11.05200	15.55757	Gnanadesikan的估计
6.55102	11.05593	15.55875	SNTO的估计
c_1 =5	c_2 =10	n_1 =987	n_2 =233, n =4249

附注 3.3　本节的方法可用于求任一连续多元分布的 MLE, 甚至用于有丢失数据的样本，进一步讨论可见 §6.1.

附注 3.4　检验有关 $\boldsymbol{\theta}$ 假设的似然比统计量被广泛地使用，显然 SNTO 可以用来计算似然比统计量的近似值，因为似然比统计量的分子和分母都有 (3.3.2) 的形式，只是区域 D 各不相同 (§1.1 与 §6.1).

§ 3.4　非线性回归模型

考虑广义的回归模型

$$EY = g(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}), \tag{3.4.1}$$

其中 $\boldsymbol{x} = (X_1, \cdots, X_p)$ 是独立随机变量， $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \cdots, \theta_s)$ 是待定

参数．回归分析的首要任务是由一组观测值 $\{Y_i, X_{i1}, \cdots, X_{ip}, i = 1, \cdots, N\}$ 来估计 $\theta_1, \cdots, \theta_s$．这个问题经常用**最小二乘法**来处理．令

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} [Y_i - g(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{\theta})]^2. \tag{3.4.2}$$

则最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 满足

$$L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \min_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}). \tag{3.4.3}$$

当 g 是 $\boldsymbol{\theta}$ 的非线性函数时，(3.4.1) 是**非线性回归模型**. Ratkowsky (1983, 1990), Nash 和 Walker-Smith (1987), Seber (1989) 和韦博成 (1989) 对非线性回归模型进行了系统地研究．参数 $\boldsymbol{\theta}$ 常常用牛顿－高斯迭代法或改进牛顿－高斯法来算出．事实上，我们能用 SNTO 来求回归系数 $\boldsymbol{\theta}$ 的估计．下面是一些常用的非线性回归模型：

$$\begin{aligned}
&EY = \exp(\theta_1 - \theta_2\theta_3^X) && \text{(Gompertz 模型)},\\
&EY = \frac{\theta_1}{1 + \exp(\theta_2 - \theta_3^X)} && \text{(若吉斯蒂克模型)},\\
&EY = \theta_1 - \theta_2\exp(-\theta_3 X^{\theta_4}) && \text{(威布尔模型)},\\
&EY = \theta_1 - \log(1 + \theta_2\exp(-\theta_3 X)) && \text{(对数模型)},\\
&EY = (\theta_1 + \theta_2 X + \theta_3 X^2)^{-1} && \text{(假日模型)},\\
&EY = \theta_1 + \theta_2\exp(-\theta_3 X) && \text{(渐近模型)}.
\end{aligned} \tag{3.4.4}$$

令 D 是 $\boldsymbol{\theta}$ 的参数空间，一般而言，D 非常之大．如何将 D 收缩为一个相当小的区域 D^*，使 $\hat{\boldsymbol{\theta}} \in D^*$，是应用 SNTO 来求 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的最重要问题．由于 $\boldsymbol{\theta}$ 没有矩估计，从而找不到一般的规则来收缩 D，因此 SNTO 在回归分析中的应用比在 MLE 中要难．我们提出下面的一些方法：

3.4.1 线性化方法

有一些非线性回归模型可以转化为线性模型，例如

$$\begin{aligned} &EY = a + b\log X, &\quad &EY = \frac{X}{aX+b}, \\ &EY = \frac{1}{a+be^{-cX}}, &\quad &EY = aX^b, \\ &EY = ae^{bX}, &\quad &EY = ae^{b/X}. \end{aligned} \tag{3.4.5}$$

例如，在 (3.4.5) 的最后一个模型中令 $Y^* = \ln Y$, $a^* = \ln a$, $b^* = b$ 和 $X^* = X^{-1}$, 则它可化为典型的线性模型

$$\hat{Y}^* = a^* + b^* X^*. \tag{3.4.6}$$

我们首先用线性模型给出 a^* 和 b^* 的最小二乘估计 $\hat{a}^*$ 和 $\hat{b}^*$, 然后通过 a, b 和 a^*, b^* 之间的逆变换来求得 a 和 b 的“最小二乘估计” $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$. 这个方法称为**线性化方法**. 由于线性化方法简单易行，得到许多教科书的推荐. 但是，用此法获得的 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ 并不是最小二乘估计. 例如，(3.4.5) 的最小二乘估计 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$ 使

$$\sum_{i=1}^{N}(Y_i - ae^{b/X_i})^2 \tag{3.4.7}$$

在 $a = \hat{a}$ 和 $b = \hat{b}$ 达极小；而在模型 (3.4.6) 中，$\hat{a}^*$ 和 $\hat{b}^*$ 使

$$\sum_{i=1}^{N}(\ln Y_i - a^* - b^* X_i)^2 \tag{3.4.8}$$

在 $a^* = \hat{a}^*$ 和 $b^* = \hat{b}^*$ 达极小. 两个最小二乘估计之间一般并不存在关系 $\hat{a}^* = \ln\hat{a}$ 和 $\hat{b}^* = \hat{b}$. 因此，我们应当直接求 (3.4.7) 的极小值点 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$.

因为参数空间 D 经常非常之大，例如 $D = R^2$ 或 $D = \{(x,y) : y > 0\}$, 如果直接在 D 上求 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$, 其效力是很低的.

我们应将 D 大大缩小为 $D^* \subset D$, 使得 $(\hat{a},\hat{b}) \in D^*$, 然后在 D^* 上求解. 根据这个想法, 我们提出了下面的 **LNL 算法**: 设非线性回归模型为 (3.4.1), 欲求满足 (3.4.3) 的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. 若模型可以线性化, 用线性化法求得的“最小二乘估计”为 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^*$, 则 LNL 算法如下:

步骤 1 用线性化方法求得相应线性模型的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^*$.

步骤 2 根据模型的类型和数据的大小选择一个分量为正的向量 $\mathbf{c}$. 令

$$D^* = \{\boldsymbol{\theta} : \hat{\boldsymbol{\theta}}^* - \mathbf{c} \le \boldsymbol{\theta} \le \hat{\boldsymbol{\theta}}^* + \mathbf{c}\}. \tag{3.4.9}$$

步骤 3 在 D^* 上用 SNTO 求函数 $L(\boldsymbol{\theta})$ 的极小值点 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, 则 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 即为欲求的最小二乘估计.

下面的例子显示如何应用 LNL 算法, 同时也告诉我们, 最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 和线性化的估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^*$ 的差别有时会很大.

例 3.4 下面的数据来自地质方面 (王学仁 (1982)):

表 3.13 数据

X	0.1	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5
Y	0.2	0.8	2.1	2.8	3.2	3.5	3.6	3.7	3.8	3.9	4.0	4.0

王学仁建议用 (3.4.5) 的最后一个模型来拟合这批数据, 他用线性化方法求得估计

$$\hat{a}^* = 3.5869 \qquad 和 \qquad \hat{b}^* = -0.3064$$

相应的全相关系数平方 $R^2 = 0.8161$, 和残差方差 $\hat{\sigma}^2 = 0.3331$.

今用 LNL 算法来求最小二乘估计 $\hat{a}$ 和 $\hat{b}$. 取 $c_1 = 2$, $c_2 = 1$, 置 $D^* = \{(x,y) : 1.537 \le x \le 5.537, -1.306 \le y \le 0.694\}$. 在 D^* 对 (3.4.7) 运用 SNTO, 求得

$$\hat{a} = 4.7061 \qquad 和 \qquad \hat{b} = -0.8119$$

相应的 $R^2 = 0.9955$, $\hat{\sigma}^2 = 0.008081$. 为比较方便起见，所有结果列于表 3.14, 并点于图 3.3 上. 表 3.14 和图 3.3 均指出，如果仅用线性化方法可能会出现较大的误差，因此，最好使用 LNL 算法.

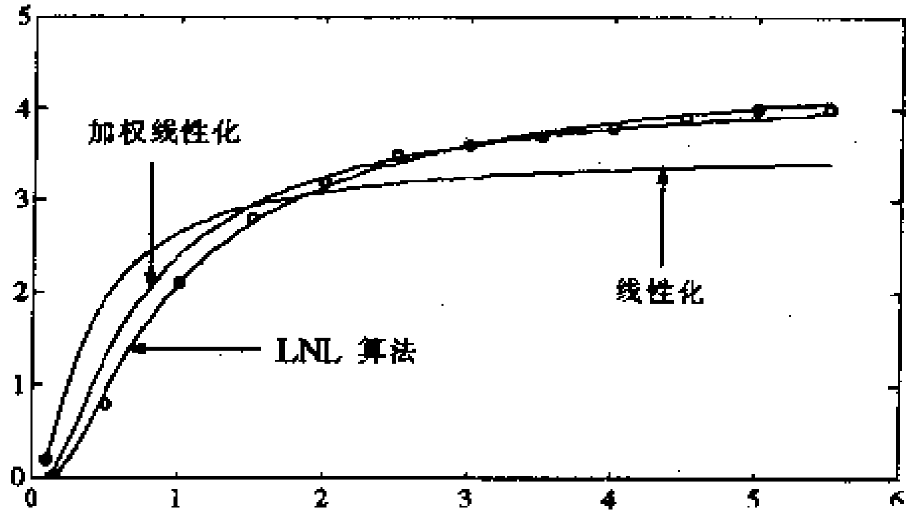


图 3.3　三种方法的曲线

表 3.14　三种方法的比较

方法	$\hat{a}$	$\hat{b}$	$\hat{\sigma}^2$	R^2
线性化	3.5869	−0.3064	0.3331	0.8161
加权线性化	4.3975	−0.6091	0.0413	0.9772
LNL 算法	4.7061	−0.8119	0.0081	0.9955

正如上面例子所指出的，用线性化技术所得之估计可能显著地偏离非线性最小二乘回归估计，但如果适当的权用于线性化技术中，则上述偏差可以被减少. 一般我们可以假定非线性模型有形式

$$Y_i = g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon_i,$$

其中 $\varepsilon_i \sim N(0, \delta^2)$. 因为假定这个模型能被线性化，一定存在函数 h 使得 $h(g(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})) = \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x})'\boldsymbol{\theta}$, 这里 $\boldsymbol{a}$ 是某个向量函数. 上面的模型线性化后给出

$$Z_i = h(Y_i) = h(g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon_i).$$

若 ε_i 可认为相当地小，则模型可用线性泰勒多项式来逼近

$$Z_i = h(g(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\theta}) + \varepsilon_i) \approx \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_i)'\boldsymbol{\theta} + h'(g(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\theta}))\varepsilon_i \approx \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_i)'\boldsymbol{\theta} + h'(Y_i)\varepsilon_i. \tag{3.4.10}$$

因为在这个线性化的模型中残差是 $h'(Y_i)\varepsilon_i$, 故比较合理的是对模型 (3.4.10) 用加权回归，求 $\boldsymbol{\theta}$ 的 **加权最小二乘估计**, 并以后者作为非线性最小二乘估计的初始值，表 3.14 显示了加权最小二乘估计的优越性.

3.4.2 部分线性化方法

上述的线性化方法只能用于结构相当简单或参数很少的非线性模型. 当线性化方法失效时，可用所谓的 **部分线性化方法** 去找 $\boldsymbol{\theta}$ 的一个初始估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0$, 然后用 SNTO 求 $\boldsymbol{\theta}$ 的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. 为说明部分线性化方法，考虑一个有三参数 θ_1,θ_2 和 θ_3 的非线性回归模型，其中参数空间为 D. 若我们能给出 θ_1 的几个粗略的估计 $\hat{\theta}_{1i}$ $(i=1,\cdots,m)$, 并且线性化的方法能用于参数 θ_2, 和 θ_3, 相应的估计为 $(\hat{\theta}_{2i},\hat{\theta}_{3i})$, $i=1,\cdots,m$. 在这 m 个估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_i=(\hat{\theta}_{1i},\hat{\theta}_{2i},\hat{\theta}_{3i})$, $i=1,\cdots,m$ 中，取有最小残差平方和的那个估计作为 $\boldsymbol{\theta}$ 的初始估计，并把它记为 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0=(\hat{\theta}_{10},\hat{\theta}_{20},\hat{\theta}_{30})$. 然后用 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0$ 和一个正常数向量 $\boldsymbol{c}$ 来造一个比 D 小得多的区域 D^* (§3.4.1), 在 D^* 上运用 SNTO 求得最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. 显然，部分线性化方法只适用于参数较少的模型，特别是三参数模型. 让我们来看一个例子.

例 3.5 下面的数据

X	0	10	20	30	40
Y	26.2	30.4	36.3	37.8	38.6

来自 Ratkowsky (1983) 附录 5, 数据集 3, 拟用模型

$$EY = \theta_1 + \theta_2\theta_3^X, \qquad 0 < \theta_3 < 1.$$

来拟合. 因为当 $X\to\infty$ 时， $EY\to\theta_1$, 我们有估计 $\hat{\theta}_{01} = y_{\max}+\Delta$, 其中 $y_{\max}=\max\{Y_1,\cdots,Y_N\}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0=(\hat{\theta}_{01},\hat{\theta}_{02},\hat{\theta}_{03})'$, Δ

是一个正数，将随后给出．从模型有

$$\log(\hat{\theta}_{01}-EY)=\log\theta_2+X\log\theta_3, \tag{3.4.11}$$

并求出 θ_2 和 θ_3 的线性化最小二乘估计和残差标准差 $\hat{\sigma}_0^2$. 现在 $y_{\max}=38.6$, 取 $\Delta=0.4, 1.4, 2.4, 3.4, 4.4$. θ_1, θ_2, θ_3 的相应估计和相应的 $\hat{\sigma}_0^2$ 列于表 3.15.

由表 3.15, $\hat{\theta}_{01}$ 应落于区间 [40.5, 42.5], 因为相应的 $\hat{\sigma}_0^2$ 有着较小的值．因此我们可采用 $\hat{\theta}_{01}=41.5$, 然后从 (3.4.11) 用线性化方法求得 θ_2 和 θ_3 的估计 $\hat{\theta}_{02}=15.1239$ 和 $\hat{\theta}_{03}=0.9567$, 得 $\boldsymbol{\theta}$ 的初始估计

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_0=(41.5,\ 15.1239,\ 0.9567)'. \tag{3.4.12}$$

参考表 3.15 中 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0$ 的各种值，取

$$\mathbf{c}=(1.5,\ 0.90,\ 0.01)'$$

得到初始参数空间

$$\begin{aligned} D^* &= [\hat{\boldsymbol{\theta}}_0-\mathbf{c}, \hat{\boldsymbol{\theta}}+\mathbf{c}] \\ &= [40,43]\times[14.2239,16.0239]\times[0.9467,0.9667]. \end{aligned}$$

运用 SNTO 并取 $\delta=10^{-5}$, $n_1=1495$, $n_2=n_3=\cdots=n_{19}=597$, 求得 $\boldsymbol{\theta}$ 和 σ^2 的近似如下

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(19)}=(41.70790424,\ 15.838814,\ 0.95628398)'$$

$$(\hat{\sigma}^{(19)})^2=1.4544739449$$

它同于 Ratkowsky (1983) 给出的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 和 $\hat{\sigma}^2$.

表 3.15 参数的初始值

$\hat{\theta}_{01}$	$\hat{\theta}_{02}$	$\hat{\theta}_{03}$	$\hat{\sigma}_0^2$	注
39	15.9951	0.9148	7.1748	
40	14.4961	0.9413	1.8730	
41	14.8135	0.9528	1.5798	*
42	15.4831	0.9599	1.6875	*
43	16.2876	0.9650	1.8658	

如果非线性模型太复杂，很难线性化，则在得到一些参数的粗略估计后，可能进行部分线性化. 例 3.5 说明了这个过程.

首先，我们用

$$\theta_1^{(0)} = \max\{Y_i\} + 0.2(\max(Y_i) - \min(Y_i)) = 41.08$$

作为 θ_1 的估计，然后由线性化方法对线性模型

$$\log(\theta_1^{(0)} - Y_i) = \log(\theta_2) + X\log(\theta_3) + (\theta_1^{(0)} - Y_i)^{-1}\varepsilon_i.$$

求得 θ_2 和 θ_3 之初始估计 $\theta_2^{(0)} = 15.329$, $\theta_3^{(0)} = 0.95392$. 因为这个初始估计比 (3.4.12) 给出的初始估计更接近于最小二乘估计，所以我们可以期望得到 $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \hat{\theta}_3$ 的较好估计. 除此而外，后面方法的程序简单.

3.4.3 在大区域上用 RSNTO

如果有关模型的性质所知甚少，我们没有有效的方法来大规模地收缩 D, 这时我们提议用下面较为保守的算法：取一个很大的矩形 $D^* = [\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 使得 $\hat{\boldsymbol{\theta}} \in D^* \subset D$, 然后在 D^* 上用 RSNTO (§3.2) 求 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的近似值. 下面例子将说明这一算法.

例 3.6 该例取自于 Hartley (1961) 和韦博成 (1989), 来自肥料试验. 欲拟合 (3.4.4) 的渐近回归模型，.

$$EY = \theta_1 + \theta_2\exp(-\theta_3 X).$$

用 X 表示标准化后的施肥量， Y 表示小麦的产量. 一组观察值获得如下：

X	-5	-3	-1	1	3	5
Y	127	151	379	421	460	426

欲求相应的 θ_1, θ_2 和 θ_3 的最小二乘估计.

假设我们对参数空间的结构一无所知，故我们取一个大的区域 $D^* = [0,1000] \times [0,300] \times [0,2]$. 然后在 D^* 对 $L(\boldsymbol{\theta})$ 运用 SNTO, 取 $\delta = 1$, $n_1 = 1220$, $n_2 = n_3 = \cdots = 418$, 获得 L 和 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的近似值如下：

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} \approx \hat{\boldsymbol{\theta}}^{(9)} = (570.73, 210.84, 0.15928), \qquad L \approx L^{(9)} = 13776.2.$$

由于初始区域 D^* 较大，上述解的误差也可能较大，因此我们用 SNTO 再试一次. 以 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(9)}$ 为中心构造一个较小的矩形

$$\bar{D} = [471, 771] \times [151, 271] \times [0.11, 0.21],$$

在 $\bar{D}$ 上运用 SNTO, 取 $\delta = 0.0001, n_1 = 1459$, $n_2 = n_3 = \cdots = n_{13} = 266$, 求得 $\boldsymbol{\theta}$ 的估计和相应的 L 极小值如下

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} \approx (523.40, 157.04, 0.19957) = \hat{\boldsymbol{\theta}}^{(13)}, \qquad L \approx 13390.1$$

$\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(13)}$ 已十分接近于 $\boldsymbol{\theta}$ 的最小二乘估计：

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (523.3,\ 157.1,\ 0.1994).$$

如果以 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(13)}$ 为中心构造一个比 $\bar{D}$ 更小的矩形，并在其中再次运用 SNTO, 我们可以获得更接近于 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的估计.

方开泰和张金廷 (1990) 运用 RSNTO 到 Ratkowsky (1983) 书中许多数据集和各种非线性模型，比较 RSNTO 的结果和经典非线性技术的结果，他们发现在绝大多数情形下 RSNTO 是有效的. 并且 RSNTO 的计算程序简单、通用，对不同的模型只要作少量修改即可使用.

§ 3.5 稳健回归模型

考虑广义回归模型 (3.4.1), $\boldsymbol{\theta}$ 的稳健估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}^*$ 满足

$$L^*(\hat{\boldsymbol{\theta}}^*) = \min_{\boldsymbol{\theta}} L^*(\boldsymbol{\theta}), \tag{3.5.1}$$

其中

$$L^*(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} h(Y_i, g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta})), \tag{3.5.2}$$

$\{Y_i, \boldsymbol{x}_i = (X_{i1}, \cdots, X_{ip})', i = 1, \cdots, N\}$ 为观测值, $h(\cdot, \cdot)$ 为满足一定正规条件的非负函数, 例如 $h(u, v) = |u - v|$.

最小二乘估计长期以来在回归分析的应用中一直占统治地位, 稳健估计的研究使统计学家考虑如何改进最小二乘估计, 并提出各种类型的稳健估计. 即在 (3.5.2) 中取不同的函数 h 我们就得到不同的稳健估计. 李国英 (1985) 与 Rousseeuw 和 Leroy (1987) 给出稳健估计一个很好的综述. 本节仅讨论称之为 l_1 回归的稳健估计, 这时

$$L^*(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} |Y_i - g(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta})|. \tag{3.5.3}$$

相应的模型可以是线性的或非线性的. 首先考虑线性模型

$$EY = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta}, \tag{3.5.4}$$

其中 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{\theta}$ 分别为 $N \times p$ 和 $p \times 1$ 矩阵. 用 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ 表示 $\boldsymbol{\theta}$ 的稳健估计, 并称之为模型 (3.5.4) 的 l_1 估计. 用 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_2$ 表示模型 (3.5.4) 的最小二乘估计. 引进如下记号

$$\|\boldsymbol{a}\|_1 = \sum_i |a_i| \qquad 和 \qquad \|\boldsymbol{a}\|_2 = \Big(\sum_i a_i^2\Big)^{1/2}$$

它们分别表示 $\boldsymbol{a}$ 的 $\boldsymbol{l_1}$ 和 $\boldsymbol{l_2}$ **模**. 若 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})$ 为一 $n\times m$ 矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的 l_1 模定义为

$$\|\boldsymbol{A}\|_1=\max_j\left(\sum_{i=1}^n|a_{ij}|\right). \tag{3.5.5}$$

对任意的向量 $\boldsymbol{a}$, 总有

$$\|\boldsymbol{a}\|_1 \ge \|\boldsymbol{a}\|_2. \tag{3.5.6}$$

已有许多有效的方法来求 $\boldsymbol{\theta}$ 的 l_1 估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$, 例如单纯形法. 现在我们来说明如何利用 SNTO 来求 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$. 由于 $\boldsymbol{\theta}$ 的参数空间 D 通常很大，若 SNTO 直接在 D 上进行，结果将不会太好. 因此我们需要有一个方法将 D 收缩为一个较小的区域 D^*, 用 D^* 代 D 作 SNTO. 解决这个问题的方法如下：

当回归模型是 (3.5.4) 时， $L^*(\boldsymbol{\theta})$ 化为

$$L^*(\boldsymbol{\theta})=\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta}\|_1, \tag{3.5.7}$$

其中 $\boldsymbol{y}=(Y_1,\cdots,Y_N)'$. 令 $d=\min_{\boldsymbol{\theta}}L^*(\boldsymbol{\theta})$ 及 $\Theta=\{\boldsymbol{\theta}:L^*(\boldsymbol{\theta})=d\}$. 则 Θ 是一切 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ 可行解的集合.

定理 3.3

$$\|\hat{\boldsymbol{\theta}}_1-\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_2\le\frac{2\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1}{\sqrt{\lambda_{\min}}}, \tag{3.5.8}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ 是 Θ 中任一元素， $\lambda_{\min}$ 是 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ 的最小特征根.

证 因为 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1\in\Theta$, 所以有 $\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1\ge\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_1\|_1$. 因此

$$\|\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_2-\hat{\boldsymbol{\theta}}_1)\|_1\le\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1+\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_1\|_1\le2\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1. \tag{3.5.9}$$

另一方面，我们有

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_2-\hat{\boldsymbol{\theta}}_1)\|_1&\ge\|\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_2-\hat{\boldsymbol{\theta}}_1)\|_2=((\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2)'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2))^{1/2}\\&\ge\|\hat{\boldsymbol{\theta}}_2-\hat{\boldsymbol{\theta}}_1\|_2\sqrt{\lambda_{\min}}.\end{aligned} \tag{3.5.10}$$

从而证明了结论.

由定理 3.3, 我们给出如下的算法将 D 收缩为一个较小的区域 D^*:

步骤 1 计算最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_2 = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$ 的最小特征根 $\lambda_{\min}$ 和 $\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1$.

步骤 2 令 $c = 2\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1/\sqrt{\lambda_{\min}}$,

$$\boldsymbol{D}^* = \{\boldsymbol{\theta} : \hat{\boldsymbol{\theta}}_2 - c\mathbf{1}_p \le \boldsymbol{\theta} \le \hat{\boldsymbol{\theta}}_2 + c\mathbf{1}_p\}, \tag{3.5.11}$$

其中 $\mathbf{1}_p = (1, \cdots, 1)'$.

步骤 3 在 D^* 上对 (3.5.7) 定义的 $L^*(\boldsymbol{\theta})$ 运用 SNTO 或 RSNTO 求它的极小值和极小值点，它们就是 d 和 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ 的近似解.

附注 3.5 不等式 (3.5.8) 是曹素元 (1992) 得到的，它定义了一个球

$$B = \left\{\boldsymbol{\theta} : \|\hat{\boldsymbol{\theta}}_2 - \boldsymbol{\theta}\|_2 \le \frac{2\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}_2\|_1}{\sqrt{\lambda_{\min}}}\right\} \tag{3.5.12}$$

而 (3.5.11) 确定的 D^* 正好是 B 的外接矩形. 在矩形上运用 SNTO 或 RSNTO 比较方便，当然我们也可在 B 上进行 SNTO, 详情将在下节讨论.

附注 3.6 条件 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = p < N$ 是必要的. 若 $\boldsymbol{X}$ 退化，则对于任意给定的数 M, 总存在 $\boldsymbol{\theta}_1 \in \Theta$ 使得 $\|\boldsymbol{\theta}_1\|_1 > M$. 这表明可行解集 Θ 是无界的，从而丧失了稳健性. 若模型是非线性的，则 $L^*(\boldsymbol{\theta})$ 由 (3.5.2) 或 (3.5.3) 给出，这时一般没有类似于 (3.5.8) 的不等式，因此不能如线性模型那样对 D^* 给出一个解析表达式，这时可用 §3.4 所述的方法来确定 D^*. 为安全起见，D^* 应足够大，使得 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ 落于 D^* 之中，然后在 D^* 中用 SNTO 求 $L^*(\boldsymbol{\theta})$ ((3.5.2)) 的极小值和极小值点，后者为 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ 的近似值.

§ 3.6 SNTO 在特定区域的翻版, SNTO–D

当 D 为矩形时，我们已经讨论了在 D 上的最优化问题 (3.1.1). 若 D 不是矩形，例如 D 是 §5.1 中所定义的 A_s，B_s，U_s，T_s 或 V_s，我们是否仍能运用 SNTO 去求 M 和 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似值呢？本节我们将对较一般区域 D 给出 SNTO 的翻版，并称之为 **SNTO–D.**

令随机向量 $\boldsymbol{x}$ 在 D 上均匀分布，且 $\boldsymbol{x}$ 有随机表示

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(U_1, \cdots, U_t) = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{u}), \tag{3.6.1}$$

其中 $\boldsymbol{u} = (U_1, \cdots, U_t)' \in C^t$，$t \leq s$ 并且 $U_1, \cdots, U_t$ 相互独立. 给予 C^t 上一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k, k = 1, \cdots, n\}$, 则在 D 上可以获得一个 NT-net $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{y}_k, k = 1, \cdots, n\}$, 其中 $\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{c}_k)$，$\boldsymbol{h}$ 为一确定函数 (§1.5). 令 $\boldsymbol{x}_0$ 为 $\mathcal{P}$ 中之一点，使 f 在该点达到 $\mathcal{P}$ 上之极大值，即 $f(\boldsymbol{x}_0) = \max_k f(\boldsymbol{y}_k)$. 令 $\boldsymbol{u}_0$ 为 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 中对应于 $\boldsymbol{x}_0$ 的点，即 $\boldsymbol{x}_0 = h(\boldsymbol{u}_0)$. 则以 $\boldsymbol{u}_0$ 为中心的矩形 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 对应于包含 $\boldsymbol{x}_0$，D 的一个子区域. 因此，借助于在 SNTO 中收缩矩形 $[\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]$ 的过程可以得到在 D 上收缩区域办法，从而得到 SNTO 在 D 上的翻版. 算法 SNTO–D 包括如下步骤：

步骤 0 初始: 令 $q = 0$, $D^{(0)} = D$, $E^{(0)} = C^t = [\boldsymbol{0}, \boldsymbol{1}]$, $\boldsymbol{a}^{(0)} = \boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$ 及 $\boldsymbol{b}^{(0)} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{1}$.

步骤 1 产生 NT-net: 在 $\boldsymbol{E}^{(q)}$ 上产生一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k^{(q)}, k = 1, \cdots, n_q\}$, 然后，获得 $D^{(q)}$ 上的一个 NT-net $\mathcal{P}^{(q)} = \{\boldsymbol{y}_k^{(q)} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{c}_k^{(q)}), k = 1, \cdots, n_q\}$.

步骤 2 计算新的近似值：求 $\boldsymbol{x}^{(q)} \in \mathcal{P}^{(q)} \cup \{\boldsymbol{x}^{(q-1)}\}$ 和 $M^{(q)}$ 使得

$$M^{(q)} = f(\boldsymbol{x}^{(q)}) \geq f(\boldsymbol{y}), \qquad \forall \boldsymbol{y} \in \mathcal{P}^{(q)} \cup \{\boldsymbol{x}^{(q-1)}\}.$$

则 $\boldsymbol{x}^{(q)}$ 和 $M^{(q)}$ 是当前 $\boldsymbol{x}^*$ 和 M 的最好的近似值.

步骤 3　停止规则: 令 $\boldsymbol{c}^{(q)}=(\boldsymbol{b}^{(q)}-\boldsymbol{a}^{(q)})/2$. 若 $\max \boldsymbol{c}^{(q)}<\delta$, δ 为预先给定的小正数，则 $\boldsymbol{x}^{(q)}$ 和 $M^{(q)}$ 可接受为近似解，并停止. 若 $\max \boldsymbol{c}^{(q)}\ge\delta$, 则进入下一步.

步骤 4　收缩区域: 令 $\boldsymbol{u}^{(q)}$ 为 C^t 中的点对应于 $\boldsymbol{x}^{(q)}$, 即 $\boldsymbol{x}^{(q)}=h(\boldsymbol{u}^{(q)})$. 定义一个新的区域 $E^{(q+1)}=[\boldsymbol{a}^{(q+1)},\boldsymbol{b}^{(q+1)}]$, 其中

$$
\begin{aligned}
a_i^{(q+1)}&=\max\left(u_i^{(q)}-\gamma c_i^{(q)},0\right),\\
b_i^{(q+1)}&=\min(u_i^{(q)}+\gamma c_i^{(q)},1),
\end{aligned}
\qquad i=1,\cdots,t,
$$

这里 γ 为预先定义的收缩比. 令 $D^{(q+1)}=\{\boldsymbol{x}=h(\boldsymbol{u}),\boldsymbol{u}\in E^{(q+1)}\}$ 为对应于 $E^{(q+1)}$, D 的子域. 置 $q=q+1$, 转向步骤 1.

附注 3.7　若 D 没有随机表示 (3.6.1), 且 D 的维数为 s, 取 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$ 为 D 的外接矩形，则可在 D 上运用 SNTO, 这时落在 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]/D$ 中的 NT-net 中的点应当除去. 下节我们将给出 SNTO-D 一些应用.

§ 3.7　非线性方程组

在统计中的许多问题经常可化为解非线性方程组，例如参数的矩估计，极大似然估计，和一元分布的离散化 (§ 4.2).

设 D 为 R^s 的一个有界区域，欲解方程组

$$
\begin{cases}
f_1(\boldsymbol{x})=f_1(x_1,\cdots,x_s)=0,\\
\qquad\cdots\\
f_t(\boldsymbol{x})=f_t(x_1,\cdots,x_s)=0.
\end{cases}
\qquad \boldsymbol{x}\in D, \tag{3.7.1}
$$

若方程组没有解析解，则有许多方法可求得数值解，例如牛顿法， **Brent 法** 和拟牛顿法 (Brent (1973), Brown (1967), 冯果忱 (1989)). 但是，这些方法要求 f_i 有连续的一阶，甚至高阶导数，或者满足一定的凸性，来保证这些方法的收敛性.

事实上，求解方程组 (3.7.1) 可以化为一个最优化问题. 令 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), \cdots, f_t(\boldsymbol{x}))$, 以及

$$f(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})\|_p, \qquad \boldsymbol{x} \in D, \tag{3.7.2}$$

这里 $p > 0$, 模为 $\boldsymbol{l_p}$ 模, 通常取 $p = 1, 2$ 或 ∞. 于是求 (3.7.1) 的一个解 $\boldsymbol{x}^*$ 等价于找一个 $\boldsymbol{x}^* \in D$ 使 $f(\boldsymbol{x})$ 达到其极小 $M = 0$. 当 (3.7.1) 的解不唯一时，我们的目的是至少求出其中的一个.

附注 3.8 虽然通过 $f(\boldsymbol{x})$ 去解方程组 (3.7.1) 不是最好的方法 (Kahaner, Moler 和 Nash (1989)), 但在大部分实际问题中仍能求得满意的解.

当 D 是矩形，我们用 SNTO 来求 (3.7.1) 的解；当 D 不是矩形，且有随机表示 (3.6.1) 时，用 SNTO-D 来求解. 现在我们考虑从 U_s 到 U_s 的一个映象，并用 SNTO-D 来求这个映象的不动点，以此为例来说明上述的方法.

令 $\boldsymbol{g}$ 是将 D 到 D 的一个连续映象，若 $\boldsymbol{x}^* \in D$ 且

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*). \tag{3.7.3}$$

则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $\boldsymbol{g}$ 在 D 上的**不动点**. 令

$$f(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\| = \sum_{i=1}^{s} |x_i - g_i(\boldsymbol{x})|, \tag{3.7.4}$$

其中 g_i 和 x_i 分别是 $\boldsymbol{g}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 的分量. 于是求不动点 (3.7.3) 是 (3.7.1) 的一个特例.

例 3.7 令 $D = U_3$ 是 R^3 中的单位球面. 令

$$\begin{cases} y_1 = (x_1 + 2x_2 + 3x_3)/S, \\ y_2 = (4x_1 + 5x_2 + 6x_3)/S, \\ y_3 = (7x_1 + 8x_2 + 9x_3)/S, \end{cases}$$

其中

$$S=[(x_1+2x_2+3x_3)^2+(4x_1+5x_2+6x_3)^2+(7x_1+8x_2+9x_3)^2]^{1/2}.$$

显然，这是从 U_3 到 U_3 的一个连续映象，由 Brower 定理，至少存在一个不动点.

令 $\{\mathbf{c}_k=(c_{k1},c_{k2}),k=1,\cdots,n\}$ 是 C^2 上的一个 NT-net, 令

$$\begin{cases} x_{k1}=1-2c_{k1} \\ x_{k2}=2\sqrt{c_{k1}(1-c_{k1})}\cos(2\pi c_{k2}) \\ x_{k3}=2\sqrt{c_{k1}(1-c_{k1})}\sin(2\pi c_{k2}), \end{cases}$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},x_{k2},x_{k3})'\}$ 是 U_3 上的一个 NT-net ((1.5.28)).

由生成矢量 (233; 1, 144) 的 *glp* 集产生一个 NT-net, 并取 $\delta=10^{-7}$. 利用 SNTO–D, 第一阶段我们获得 $M^{(1)}=0.1368986$ 和

$$\boldsymbol{x}^{(1)}=(0.2660945,\ 0.5760145,\ 0.7729173)'$$

相应的 $\boldsymbol{u}^{(1)}=(0.3669528,\ 0.1480687)$ ((3.6.1)). 然后取生成矢量 (144; 1, 89), 在 $E^{(1)}$ 上产生 NT-net, $E^{(1)}$ 是以 $\boldsymbol{u}^{(1)}$ 为中心的矩形，并按 SNTO–D 之规则得 $E^{(1)}=[0.1169529,\ 0.6169528]\times[0,0.3980687]$. 我们求得

$$\begin{aligned} M^{(2)}&=0.1092555, \\ \boldsymbol{x}^{(2)}&=(0.3042889,\ 0.5017185,\ 0.8097449) \\ \boldsymbol{u}^{(2)}&=(0.3478556,\ 0.1617154) \\ E^{(2)}&=[0.2228556,\ 0.4728556]\times[0.00367154,\ 0.2867154], \end{aligned}$$

如此下去，最后求得 M 和 $\boldsymbol{x}^*$ 之近似值如下：

$$\begin{aligned} M^{(21)}&=1.043081\times10^{-7}, \\ \boldsymbol{x}^{(21)}&=(0.2319707,\ 0.5253221,\ 0.8186734). \end{aligned}$$

在 SNTO-D 的全部过程中共用 3113 个点，其结果的精度是很高的.

例 3.8 考虑映象

$$\begin{cases} y_1 = (x_1 + 2x_2 + 3x_3)/S, \\ y_2 = (4x_1 + 5x_2 + 6x_3)/S, \\ y_3 = (7x_1 + 8x_2 + 9x_3)/S, \end{cases}$$

其中 $S = 12x_1 + 15x_2 + 18x_3$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3) \in D = T_3$. 这是从 D 到 D 的一个连续映象，且 $y_2 \equiv 1/3$. 我们欲求这个映象的不动点. 利用 SNTO–D, 取 $n_1 = 233$, $n_2 = 144$, 经 18 次区域收缩，得到 M 和 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似值如下：

$$M^{(18)} = 2.98 \times 10^{-7} \quad 和 \quad \boldsymbol{x}^{(18)} = (0.1471927, 0.3333332, 0.5194746)'$$

它们十分接近于 $M = 0$ 和 $\boldsymbol{x}^* = (0.1471927,\ 1/3,\ 0.5194742)'$.

关于不动点，有一系列著作，读者可以从中了解到更详尽的讨论. 例如 Dixon (1972), Todd (1976), Allgower 与 Georg (1980) 及王则柯 (1986, 1987).

附注 3.9 在 SNTO–D 的区域收缩时，是通过选择收缩比 γ 来缩短对应矩形每一边的长度，从而每一次收缩新区域的体积是原区域体积的 γ^s 倍. 为比较方便起见，在本例中我们采用了收缩比 1/2, 1/4, 1/8 和 1/16. 我们发现，若取 $\gamma \le 1/4$, 则计算量比 $\gamma = 1/2$ 时至少可减少一半. 计算结果列于表 3.16, 表中 T 表示区域收缩的次数. 当 γ 较小时，n_2 一般不能取得太小.

表 3.16 不同收缩比的比较

收缩比	n_1	n_2	T	$L(x)$
1/2	233	144	18	2.98E−7
1/4	233	144	9	9.54E−7
1/8	233	144	9	9.54E−7
1/16	233	144	9	5.96E−8

解一元非线性方程 $F(x)=0$ 时，许多方法常常先找 a 和 b 使得 $F(a)$ 和 $F(b)$ 有不同的符号，这时表明有一个解 $x^*\in[a,b]$. 然后逐步缩小这个区间，使得每个区间的端点，函数值有不同的符号. 如此下去，直至达到预定之精度.

对于多元非线性方程组 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$, 不可能和一元方程组一样去解，尽管如此，函数 f_i 的符号对于寻求解的位置仍是有用的. 若通过 SNTO 对函数 $f(\boldsymbol{x})=-\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})\|_p$ 求极大值的途径来解非线性方程组，我们希望保证每个函数 f_i 在区域 $D^{(t)}$ 中函数值变号，利用这个性质，可提高解落于 $D^{(t)}$ 的机会.

具体来讲，在收缩的每一步，应当寻找一个集合 $Q^{(t+1)}\subseteq D^{(t+1)}$ 使得

$$
\begin{aligned}
&\forall i,\ \exists \boldsymbol{y}_+,\boldsymbol{y}_-\in Q^{(t+1)} \qquad \text{使}\\
&\operatorname{sign}(f_i(\boldsymbol{y}_+))=+1, \qquad \operatorname{sign}(f_i(\boldsymbol{y}_-))=-1.
\end{aligned} \tag{3.7.5}
$$

为了满足这个条件， SNTO 的步骤 4 修改如下：

步骤 4* 收缩区域: 置 $Q^{(t+1)}=\{\boldsymbol{x}^{(t)}\}$. 逐步加点 $\boldsymbol{y}\in\mathcal{P}^{(t)}\cup Q^{(t)}$ 到 $Q^{(t+1)}$ 中按 $f(\boldsymbol{y})$ 的值由小到大之次序直至 (3.7.5) 成立. 令 $[\boldsymbol{\alpha}^{(t+1)},\boldsymbol{\beta}^{(t+1)}]$ 为包含 $Q^{(t+1)}$ 的最小矩形，定义新的区域 $[\boldsymbol{a}^{(t+1)},\boldsymbol{b}^{(t+1)}]$ 如下：

$$
\begin{aligned}
a_i^{(t+1)}&=\max\left(\min\left(x_i^{(t)}-\gamma c_i^{(t)},\alpha_i^{(t+1)}\right),a_i\right)\\
b_i^{(t+1)}&=\min\left(\max\left(x_i^{(t)}+\gamma c_i^{(t)},\beta_i^{(t+1)}\right),b_i\right)
\end{aligned} \tag{3.7.6}
$$

这里 γ 为预先给定的收缩比.

另一个比 (3.7.5) 更保守的条件是要求

$$
\begin{aligned}
&\forall \boldsymbol{r}=(r_1,\cdots,r_s) \quad \text{其中} \quad r_i=\pm1,\\
&\exists \boldsymbol{x}_r\in Q^{(t)} \quad \text{使} \quad \operatorname{sign}(f_i(\boldsymbol{x}_r))=r_i \quad \forall i.
\end{aligned} \tag{3.7.7}
$$

我们已成功地运用这个算法到许多问题之中，结果表明该算法比直接应用 SNTO 更为有效，这个算法的主要思想来自 F.J. Hickernell.

§ 3.8 有约束的回归

在许多实际问题中，遇到有约束的回归. 考虑广义的回归模型 (3.4.1)

$$EY = g(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}), \tag{3.8.1}$$

$\boldsymbol{\theta} \in \Theta$, Θ 为参数空间，带有约束 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{\theta}) \in D^* \subset R^t$, $t \leq s$. 这时我们如何能获得 $\boldsymbol{\theta}$ 的一个估计呢？令

$$D = \{\boldsymbol{\theta} : \boldsymbol{\theta} \in \Theta, \ \boldsymbol{v}(\boldsymbol{\theta}) \in D^*\}. \tag{3.8.2}$$

则最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 应满足

$$L(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \min_{\boldsymbol{\theta} \in D} L(\boldsymbol{\theta}), \tag{3.8.3}$$

其中 $L(\boldsymbol{\theta})$ 由 (3.4.2) 所定义. 我们可以用 §3.6 所介绍的 SNTO 的翻版来求 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$.

为了说明 SNTO 对约束回归的应用，这里我们仅讨论在配方数据中有约束的回归模型. 考虑线性模型

$$EY = a + b_1 x_1 + \cdots + b_s x_s \tag{3.8.4}$$

具有约束

$$b_1 + \cdots + b_s = 1, \qquad b_i \geq 0, \quad i = 1, \cdots, s, \tag{3.8.5}$$

即 $\boldsymbol{b} = (b_1, \cdots, b_s) \in T_s$.

Boot (1964) 建议将这个模型化为一个二次规划的问题. Waterman (1974) 建议在由 s 个自变量组成的一切可能的回归模型

中来获得最小二乘估计. 当 s 较大时，他的方法计算量是很可观的. 方开泰，王东谦和吴国富 (1982) 和方开泰和贺曙东 (1985) 运用 **消去变换** 来解决这一问题. 虽然该法求最小二乘估计的收敛速度是相当快的，但相应的程序比较复杂，该程序可在中国科学院计算中心所研制的统计软件包 SASD 中找到.

为简单起见，不妨设 (3.8.4) 中 $a=0$. 当 $a \neq 0$ 时，可类似地处理. 给了一组观测值 $\{Y_i, X_{i1}, \cdots, X_{is}, i=1,\cdots,N\}$, 令

$$L(\boldsymbol{b}) = L(b_1,\cdots,b_s) = \sum_{i=1}^{N}(Y_i - b_i X_{i1} - \cdots - b_s X_{is})^2, \quad (3.8.6)$$

则最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{b}} = (\hat{b}_1,\cdots,\hat{b}_s)$ 满足

$$L(\hat{\boldsymbol{b}}) = \min_{\boldsymbol{b}\in T_s} L(\boldsymbol{b}). \quad (3.8.7)$$

给予 C^{s-1} 给一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1},\cdots,c_{k,s-1})', k=1,\cdots,n\}$. 则由 (1.5.33) 定义的 $\{\boldsymbol{x}_k = (x_{k1},\cdots,x_{ks})', k=1,\cdots,n\}$ 为 T_s 上的一个 NT-net. 利用这个 NT-net 和 SNTO-D, 可解决下面的问题.

例 3.9 该例由方开泰，王东谦和吴国富 (1982) 给出，他们研究沥青混凝土配方. 数据列于表 3.17. $\boldsymbol{b}$ 的最小二乘估计为

$$\hat{\boldsymbol{b}} = (0.0761,\ 0.2941,\ 0.2191,\ 0.1561,\ 0.0000,\ 0.2545)'$$

它是通过 7 次消去变换而获得 (方开泰, 王东谦和吴国富 (1982)), 其相应的残差平方和为 12.62245.

现在运用 SNTO–D 来处理这一问题，取 $\delta = 10^{-6}$, $n_i = 1069$, $i=1,2,\cdots$, 则有 $M^{(14)} = 12.62459$ 及

$$\boldsymbol{b}^{(14)} = (0.0764,\ 0.2933,\ 0.2210,\ 0.1546,\ 0.0000,\ 0.2546)'$$

它们和 $M = 12.62245$ 及 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 相当接近. 为了便于读者核对计算过程，在表 3.18 列出了所有的 $M^{(t)}$, $1 \le t \le 14$.

表 3.17 数据

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	Y
100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
10.15	72.25	100.0	100.0	100.0	100.0	85.0
0	0	87.5	98.4	94.7	100.0	60.0
0	0	32.8	65.55	88.4	100.0	45.0
0	0	27.3	52.45	86.8	100.0	37.0
0	0	12.0	15.05	78.0	95.3	29.0
0	0	4.7	0.95	5.2	77.9	22.0
0	0	4.2	0.55	5.2	71.9	19.0
0	0	1.5	0.20	0.4	56.4	15.0

表 3.18 运用 SNTO–D 的结果

t	1	2	3	4	5
$M^{(t)}$	46.08358	37.20098	18.56352	16.96464	13.60261
t	6	7	8	9	10
$M^{(t)}$	13.05130	12.74801	12.66653	12.63025	12.62659
t	11	12	13	14	
$M^{(t)}$	12.62525	12.62513	12.62464	12.62459	

附注 3.10 该例表明运用 SNTO–D 的计算量大于运用消去变换，但 SNTO–D 的计算机程序十分简单，因此 SNTO–D 对于处理有约束回归的人来说，仍是有价值的.

§ 3.9 多元分布的众数

在一些实际问题中，众数是分布密度的有用特征数. 但对许多多元分布，众数并无解析表达式，因此需要用数值方法来求其近似值. 设 $p(\boldsymbol{x})$ 为 s 维分布 $F(\boldsymbol{x})$ 的 p.d.f., 若存在 $\boldsymbol{x}_0 \in R^s$ 使

$$p(\boldsymbol{x}_0) = \max_{\boldsymbol{x} \in D} p(\boldsymbol{x}), \tag{3.9.1}$$

此处 D 为 $p(\boldsymbol{x})$ 的支撑，即 $D = \{\boldsymbol{x} : p(\boldsymbol{x}) > 0\}$. 则 $\boldsymbol{x}_0$ 称为 $F(\boldsymbol{x})$

(或 $p(\boldsymbol{x})$) 的众数. 因此求众数 $\boldsymbol{x}_0$ 是一个典型的最优化问题，故可用 SNTO-D 获得 $\boldsymbol{x}_0$ 的近似值. 现分两种情形进行讨论：

(a) D 是 s 维的一个很大的区域，如 $D=R^s$ 或 $D=R^s_+$，后者是 R^s 的正部分. 由于区域太大，导致数值计算的困难. 众所周知，在众数和均值之间有一定的联系. 对一元分布，若分布是关于某点对称和单峰的，其均值和众数重合，否则两者不一致，其差别的绝对值依赖于分布的偏度. 令 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 分别为 $F(\boldsymbol{x})$ 的均值向量和标准差向量. 对绝大多数分布，$\boldsymbol{x}_0$ 属于矩形 $[\boldsymbol{\mu}-3\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\mu}+3\boldsymbol{\sigma}]$ 和 D 的交集. 用 $D^{(1)}$ 表示这个交集，它可用于 SNTO–D 的初始区域来求 $\boldsymbol{x}_0$. 如果分布几乎是对称的，则 $D^{(1)}$ 可取为 $[\boldsymbol{\mu}-2\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\mu}+2\boldsymbol{\sigma}]\cap D$ 或甚至 $[\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{\sigma}]\cap D$.

(b) D 的维数小于 s. 若用 SNTO-D 求 $F(\boldsymbol{x})$ 的众数 $\boldsymbol{x}_0$, 我们需要 D 上的 NT-net, 或包含 $\boldsymbol{x}_0$ 的 D 的一个子域的 NT-net. 我们给出下面的例子来说明.

例 3.10 可加若吉斯蒂克椭球分布.

在 §2.6 我们已定义了可加若吉斯蒂克椭球分布，它的分布密度具有形式

$$f(\boldsymbol{x})=(\det\boldsymbol{\Sigma})^{-1/2}\prod_{i=1}^{s}x_i^{-1}g((\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})), \qquad (3.9.2)$$

其中 $\boldsymbol{y}_x$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的对数比向量，它由 (2.6.9) 给出. 当 $g(u)=(2\pi)^{-(s-1)/2}\exp(-\frac{1}{2}u)$ 时，(3.9.2) 化为可加若吉斯蒂克正态分布的 p.d.f. 当 (3.9.2) 中的函数 g 有形式

$$g(u)=c(1+u/m)^{-p}, \qquad p>\frac{s}{2}, \quad m>0 \qquad (3.9.3)$$

时，其中 c 是正规化常数，相应的分布称为**可加若吉斯蒂克椭球 Pearson VII 型分布** (§2.6). 这时求 $f(\boldsymbol{x})$ 的众数，等价于求

$$h(\boldsymbol{x})=\prod_{i=1}^{s}x_i^{-1}\left[1+\frac{1}{m}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}_x-\boldsymbol{\mu})\right]^{-p} \qquad (3.9.4)$$

在 T_s 上的极大值.

下面我们利用 SNTO-D 在 T_s 上求 $\boldsymbol{x}_0$ 的近似值，但区域的收缩直接在 T_s 上进行.

步骤 1 在 $D^{(1)} = T_s$ 上取一个 NT-net $\mathcal{P}^{(1)} = \{\boldsymbol{y}_k^{(1)}, k = 1, \cdots, n_1\}$. 在这些点上求 $h(\boldsymbol{x})$ 的极大值 $M^{(1)}$, 设它在 $\boldsymbol{x}^{(1)} = (x_1^{(1)}, \cdots, x_s^{(1)})'$ 上达到.

步骤 2 求 $D^{(1)}$ 的一个较小子域 $D^{(2)}$, 例如可取 $D^{(2)}$ 为重心近于 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 的区域. 具体来讲，我们选择 $\{a_i\}$ 使

$$0 \le a_i < x_i^{(1)}, \qquad i = 1, \cdots, s.$$

置 $a = a_1 + \cdots + a_s$, $b_i = a_i + 1 - a$, $i = 1, \cdots, s$. 则

$$\begin{aligned} 1 \ge b_i &\ge a_i + \sum_{j=1}^{s} x_j^{(1)} - \sum_{k=1}^{s} a_k \\ &= x_i^{(1)} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \ne i}}^{s} (x_j^{(1)} - a_j) > x_i^{(1)}, \qquad i = 1, \cdots, s. \end{aligned}$$

令

$$\begin{aligned} D^{(2)} = \{\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_s)' : a_1 \le x_i \le b_i, \\ i = 1, \cdots, s, \ \boldsymbol{x} \in D^{(1)}\}. \end{aligned}$$

设 $\{\boldsymbol{z}_k = (z_{k1}, \cdots, z_{ks})', k = 1, \cdots, n_1\}$ 为 T_s 上的一个 NT-net, 计算

$$y_{ki}^{(2)} = a_i + (1 - a) z_{ki}, \qquad i = 1, \cdots, s, \quad k = 1, \cdots, n_2,$$

则集合 $\mathcal{P}^{(2)} = \{\boldsymbol{y}_k^{(2)}, k = 1, \cdots, n_2\}$ 为 $D^{(2)}$ 上的一个 NT-net. 用 $M^{(2)}$ 表示函数在 $\mathcal{P}^{(1)} \cup \mathcal{P}^{(2)}$ 上的极大值， $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 是相应的极大值点.

步骤 3 设 $M^{(t)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(t)}$ 为在第 t 步的函数 $h(\boldsymbol{x})$ 的极大值和极大值点，利用和步骤 2 中类似的方法可将区域 $D^{(t)}$ 收缩为 $D^{(t+1)}$. 然后在 $D^{(t+1)}$ 上产生一个 NT-net, 利用它可求得第 $t+1$ 步的极大值 $M^{(t+1)}$ 和极大值点 $\boldsymbol{x}^{(t+1)}$.

重复步骤 3 直至区域足够小为止. 则最后一步的 $M^{(t+1)}$ 期望接近于函数的全局极大值.

应用上面的算法到具有参数 $s=3$, $p=9$, $m=5.5$,

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}1 & -0.7\\0.7 & 1\end{pmatrix}$$

的函数 (3.9.4), 取 $n_1=n_2=\cdots=233$, $h_1=1$, $h_2=144$ 的 *glp* 集，其计算结果列于表 3.19, 我们看到只用 4 次区域收缩，其结果已十分接近于真正的解. 因为每个阶段我们都需要检查计算结果，因此根据计算结果反馈的信息，可以加速区域收缩的进程.

表 3.19

t	a_t	b_t	$M^{(t)}$	$x_1^{(t)}$	$x_2^{(t)}$	$x_3^{(t)}$
1	0.0000	1.0000	26.55203	0.3271035	0.3306723	0.3422242
2	0.3000	0.4000	26.97836	0.3304331	0.3343395	0.3352274
3	0.3300	0.3400	26.99543	0.3327104	0.3330673	0.3342224
4	0.3330	0.3340	26.99994	0.3332711	0.3333067	0.3334223
全局极大值			27.00000	0.333333	0.3333333	0.3333333

§ 3.10 SNTO 和其它方法的混合

通过以前各节的许多例子和讨论表明 SNTO 有许多优点：对多峰函数，运用 SNTO 求得全局极大值的机会比其它方法为高； SNTO 的计算机程序容易编制，且比较通用，对不同的函数仅作小小修改即可使用； 不需要计算函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在 D 上的

微商. 但 SNTO 也有一些缺点: 首先, 最优化问题的区域必须是有界的, 若原始问题的区域无界, 则必须根据函数 f 的性质将区域化为有界. 在前几节的许多问题中我们都作了这种预处理. 第二, 和牛顿型方法相比, SNTO 有时需要更长的计算时间. 尽管如此, 如何加快收敛速度仍是一个值得研究的问题, 本节就讨论这个问题. 第三, 若函数 f 在 D 的一个很大区域 (记作 D_2) 内接近于零 (图 3.4), 运用 SNTO 时仍需在 D_2 放上许多点, 显然这种做法是不合算的. 因此, SNTO 和 SNTO–D 应在上述三点上加以改进. 现提出一些改进 SNTO 和 SNTO–D 的建议如下:

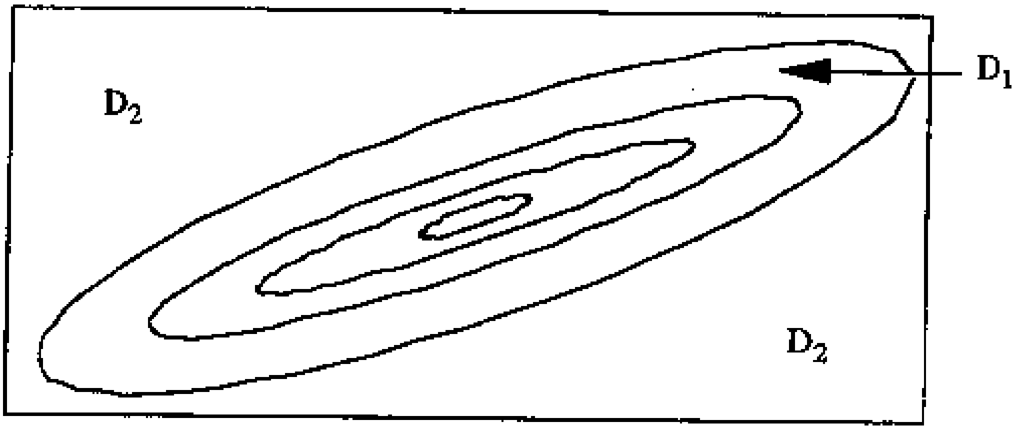


图 3.4 f 的等高线图

3.10.1 SNTO 和牛顿型方法的混合

有许多最优化的方法对单峰函数具有很快的收敛速度, 但如果函数不是单峰, 有可能只求得一个局部极大值. 若我们能用 SNTO 或 SNTO–D 将区域 D 收缩为 D^*, 使得 $x^* \in D^*$, 且 f 在 D^* 上是单峰的. 则我们可以用**牛顿型方法**在 D^* 上找出 $f(x)$ 的极大值点 x^*. 这个思想导致两类方法的混合, 混合后将比 SNTO 效率更高, 比牛顿型法更为稳健. 下面是这一算法的轮廓.

步骤 0 初始: 置 $t=0$, $D^{(0)}=D$.

步骤 1 产生 NT-net: 用 NTM 产生一个有 n_t 个点的 NT-net $\mathcal{P}^{(t)}$, 它在 $D^{(t)}=[\boldsymbol{a}^{(t)},\boldsymbol{b}^{(t)}]$ 上均匀散布.

步骤 2 由 NT-net 计算新的近似值: 求 $\boldsymbol{x}^{(t)}\in\mathcal{P}^{(t)}\cup\{\boldsymbol{x}^{(t-1)}\}$ 及 $M^{(t)}$ 使得 $M^{(t)}=f(\boldsymbol{x}^{(t)})\geq f(\boldsymbol{y}),\forall\boldsymbol{y}\in\mathcal{P}^{(t)}\cup\{\boldsymbol{x}^{(t-1)}\}$. 则 $\boldsymbol{x}^{(t)}$ 和 $M^{(t)}$ 是当前 $\boldsymbol{x}^*$ 和 M 的最好近似值.

步骤 3 NT 停止规则: 令 $\boldsymbol{c}^{(t)}=(\boldsymbol{b}^{(t)}-\boldsymbol{a}^{(t)})/2$. 若 $\max(\boldsymbol{c})<\delta$, 则 $D^{(t)}$ 已足够小, $\boldsymbol{x}^{(t)}$ 和 $M^{(t)}$ 被接受为近似解, 并停止. 若 $\max(\boldsymbol{c})\geq\delta$, 进入下一步.

步骤 4 收缩区域: 定义一个新的区域 $D^{(t+1)}=[\boldsymbol{a}^{(t+1)},\boldsymbol{b}^{(t+1)}]$ 如下:

$$
\begin{aligned}
a_i^{(t+1)}&=\max(x_i^{(t)}-\gamma c_i^{(t)},a_i),\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad i=1,\cdots,s,\\
b_i^{(t+1)}&=\max(x_i^{(t)}+\gamma c_i^{(t)},b_i),
\end{aligned}
$$

其中 γ 为预先定义的收缩比.

步骤 5 用牛顿型法计算新的近似值: 置 $t=t+1$, 用牛顿型方法来计算 $\boldsymbol{x}^*$ 的新的近似值 $\boldsymbol{x}^{(t)}$, 置 $M^{(t)}=f(\boldsymbol{x}^{(t)})$.

步骤 6 NT /牛顿型分叉规则: 若 $M^{(t)}<M^{(t-1)}$, 则牛顿型法该步不起作用, 取消该步, 回到步骤 1. 否则进入步骤 7.

步骤 7 牛顿型停止规则: 若 $\|\boldsymbol{x}^{(t)}-\boldsymbol{x}^{(t-1)}\|<\delta$, 则 $\boldsymbol{x}^{(t)}$ 和 $M^{(t)}$ 接受为近似解, 停止; 否则回到步骤 5.

若在上述混合方法中将牛顿型方法换成其它优化方法也是可行的. 类似于利润分析, 先用单纯形方法, 再用 Newton-Raphson 方法, Lai (1992) 给出许多例子表明混合方法的确加快了收敛速度, 他选用了一些经典的例子, 并指出混合方法既超过 SNTO, 也超过共轭梯度法,

3.10.2 SNTO 与蒙特卡罗优化方法的混合

SNTO 的效力不够高的另一原因是没有考虑函数的性质，例如在图 **3.4** 中，若使用的 **NT-net** 中有较多的点落于 D_1，较少的点落于 D_2，而且优化的区域在逐步缩小，则算法的效力有可能提高. 因此，提高 **SNTO** 效力的另一个途径是产生非均匀的 **NT-net**，即 $\mathcal{P}^{(t)}$ 不是均匀分布的代表点，而是某一分布函数 $F^{(t)}(\boldsymbol{x})$ 的代表点，例如 $F^{(t)}$ 可取中心在 $\boldsymbol{x}^{(t-1)}$ 的多元正态分布. 这样一种修改的好处是，使得在 $\mathcal{P}^{(t)}$ 中有较多的点近于全局极大值. 在蒙特卡罗的许多优化方法中，也采用了这个思想. 利用该思想来修改 **SNTO** 或 **SNTO–D** 只要修改他们的步骤 **1**.

步骤 1　产生 NT-net: 在 $D^{(t)}$ 上产生一个 **NT-net** $\mathcal{P}^{(t)}$，然后产生 $F^{(t)}(\boldsymbol{x})$ 的代表点 (§ **4.2**).

在上面的步骤中假定 $F^{(t)}(\boldsymbol{x})$ 是已知的，实际上，我们能够从迭代法的前一步信息来估计 $F^{(t)}$. **Tang (1992)** 给出了一种方法如下：令 $\bar{f}^{(t-1)}$ 为 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\mathcal{P}^{(t-1)}$ 上的样本均值向量，令

$$\mathcal{P}_*^{(t-1)} = \{\boldsymbol{x} \in \mathcal{P}^{(t-1)} : f(\boldsymbol{x}) > \bar{f}^{(t-1)}\}.$$

则 $\mathcal{P}_*^{(t-1)}$ 中的点较接近于 $\boldsymbol{x}^*$，利用 $\mathcal{P}_*^{(t-1)}$ 的样本均值向量和样本协差阵来定义多元正态分布 $F^{(t)}$.

有一系列蒙特卡罗优化方法，如非自适应随机方法，自适应随机方法，双实验随机方法，收 - 拒随机方法，统计梯度随机方法 (**Rubinstein (1986)**). 将这些方法的想法用于 **NTM** 优化法，我们可以获得更有效的优化法程序.

习题

3.1　画出例 **3.1** 中函数 f 的等高线图，并编一个计算程序来给出表 **3.2** 的结果.

3.2 令 $f_1(\boldsymbol{x})=\exp(\sum_{j=1}^s x_j)\sin(\sum_{j=1}^s x_j)$, $\boldsymbol{x}\in C^s$, 对 $s=2$ 时画出 f_1 的等高线图，并编一个计算程序来求 f_1 的极大值和极大值点.

3.3 令

$$f_2(\boldsymbol{x})=\exp\left(\prod_{j=1}^s x_j^j\right)\sin\left(\sum_{j=1}^s x_j\right),\qquad \boldsymbol{x}\in C^s$$

和

$$f_3(\boldsymbol{x})=-\exp\left(\prod_{j=1}^s x_j\right)\sin\left(\sum_{j=1}^s jx_j\right),\qquad \boldsymbol{x}\in C^s.$$

利用下面的方法编制一个计算程序，当 $s=3,4$ 时求出 f_2 和 f_3 的极大值和极大值点.

(a) 在 C^s 上产生一个无限的 **NT-net**, 并用 **(3.1.8)** 的方法. 例如，利用在 §**1.3** 定义的 *gp*-**1**, *gp*-**2** 方法，**H–W**, **Haber**, 及 **Hammersley** 方法.

(b) 应用 **SNTO.**

3.4 令 $f_1(x,y)$ 和 $f_2(x,y)$ 为所谓的 **Rosenbrock** 函数:

$$\begin{aligned} f_1(x,y)&=100(y-x)^2+(x-1)^2,\\ f_2(x,y)&=10000(y-x)^2+(x-1)^2, \end{aligned}\qquad -3\le x,\quad y\le 2.$$

画出它们的等高线图，并用牛顿法求它们的极大与极大值点.

3.5 令 $f_4(\boldsymbol{x})=-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})'\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})$, 其中 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{a}\in R^s$, $\boldsymbol{A}:s\times s$, $\boldsymbol{A}>0$ 给定，显然函数 f_4 有极大值 0 和极大值点 $\boldsymbol{a}$. 设 $\boldsymbol{a}\sim U(C^s)$, 并由蒙特卡罗法产生，若要求有精度 $\|\boldsymbol{a}-\tilde{\boldsymbol{a}}\|\le 10^{-7}$, 其中 $\tilde{\boldsymbol{a}}$ 是用某种计算方法求得的 $\boldsymbol{a}$ 的近似解. 试给出牛顿法，加速牛顿法，单纯形法和 **SNTO** 的比较，在比较中取 $\boldsymbol{A}$ 的对角元素全为 **1**, 非对角元素全为 ρ ($|\rho|<1$). 分别用 $\rho=-0.9,-0.3,\ 0.3,\ 0.9$ 进行计算. $\boldsymbol{a}$ 通过蒙特卡罗法产生，并产生 **100** 个 $\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_{100}$, 统计它们的计算时间，其解要符合要求的精度.

3.6 令

$$f_5(\boldsymbol{x}) = -[\lambda_1(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})'\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}) + \lambda_2(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})'\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})],$$

其中 $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 > 0$, $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, $\boldsymbol{B} > 0$, $\boldsymbol{B} : s \times s$, $\boldsymbol{b} \sim U(D)$, $D = [\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a} + \boldsymbol{1}_s]$, $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 同于练习 3.5. 将练习 3.5 中的比较方法用于 f_5.

3.7 下面的数据来自三参数 γ, α β 的威布尔分布, 利用 NTM 给出 γ, α, β 的极大似然估计 (§ 3.3).

5.37	5.92	4.81	4.97	5.97	4.24	4.96	4.45	4.93	4.42
5.57	6.06	5.59	5.31	5.58	6.64	5.36	4.64	4.64	5.41
4.79	6.25	5.14	5.56	4.50	5.62	5.77	4.53	4.85	6.08
4.50	5.84	4.90	5.09	6.44	3.98	3.88	5.66	6.58	6.10
7.14	6.15	1.44	3.82	5.71	3.93	4.78	5.05	3.94	5.28
5.66	7.83	4.52	2.91	6.67	4.14	4.70	4.53	5.04	6.37
6.92	6.55	6.06	5.89	7.71	4.82	6.03	4.98	7.31	5.60
5.84	6.92	6.65	6.52	6.42	5.24	7.49	3.42	5.11	5.35
4.34	5.64	4.07	6.64	5.14	5.07	7.75	6.02	7.01	8.01
4.62	6.56	6.74	4.22	6.52	6.34	6.30	5.15	6.86	5.38

3.8 下面的数据来自参数为 α β 的贝塔分布, 用 NTM 给出 α 和 β 的极大似然估计.

0.21	0.18	0.41	0.52	0.49	0.66	0.24	0.38	0.20	0.30
0.49	0.32	0.43	0.31	0.15	0.18	0.28	0.45	0.62	0.36
0.37	0.61	0.38	0.42	0.50	0.35	0.31	0.37	0.21	0.46
0.43	0.47	0.26	0.53	0.49	0.28	0.74	0.43	0.51	0.32
0.63	0.34	0.39	0.61	0.25	0.39	0.37	0.39	0.28	0.27
0.60	0.42	0.66	0.11	0.41	0.31	0.33	0.28	0.34	0.20
0.52	0.17	0.27	0.29	0.53	0.23	0.33	0.45	0.44	0.41
0.49	0.30	0.09	0.37	0.28	0.55	0.57	0.42	0.45	0.30
0.16	0.40	0.23	0.32	0.29	0.52	0.33	0.48	0.36	0.23
0.45	0.52	0.35	0.57	0.37	0.44	0.60	0.49	0.49	0.53

3.9 用部分线性化和 **RSNTO** 算法来拟合如下四个数据集

Set I		Set II		Set III		Set IV	
x	y	x	y	x	y	x	y
9	8.93	1	16.08	0	1.23	0.5	1.3
14	10.80	2	33.83	1	1.52	1.5	1.3
21	18.59	3	65.80	2	2.95	2.5	1.9
28	22.33	4	97.20	3	4.34	3.5	3.4
42	39.35	5	191.55	4	5.26	4.5	5.3
57	56.11	6	326.20	5	5.84	5.5	7.1
63	61.73	7	386.87	6	6.21	6.7	10.6
70	64.62	8	520.55	8	6.50	7.5	16.0
79	67.08	9	590.03	10	6.83	8.5	16.4
		10	651.92			9.5	18.3
		11	724.93			10.5	20.9
		12	699.56			11.5	20.5
		13	689.96			12.5	21.3
		14	637.56			13.5	21.2
		15	717.41			14.5	20.9

试用如下五个模型

$$\hat{Y} = \alpha \exp[-\exp(\beta - \gamma x)] \qquad \hat{Y} = \frac{\alpha}{1 + \exp(\beta - \gamma x)}$$

$$\hat{Y} = \frac{\alpha}{[1 + \exp(\beta - \gamma x)]^{1/\delta}} \qquad \hat{Y} = \frac{\beta\gamma + \alpha x^{\delta}}{\gamma + x^{\delta}}$$

及

$$\hat{Y} = \alpha + \beta \exp(-\gamma x^{\delta})$$

3.10 下面的例子来自钢铁工业，是方开泰，全辉和陈庆云 (1989) 的例 5.2

X	2	3	4	5	7	8
Y	106.42	108.20	109.58	110.00	109.93	110.49

X	11	14	15	16	18	19
Y	110.59	110.60	110.90	110.76	111.00	111.20

利用 **LNL** 算法，用下面的几个模型来拟合数据：

$$\hat{Y} = \frac{1}{a + b/X} \qquad \hat{Y} = ae^{b/X} \qquad \hat{Y} = \frac{X}{aX + b}$$

和

$$\hat{Y} = \frac{1}{a + be^{-X}}.$$

求参数 a, b 的最小二乘估计和稳健估计，后者选用 $h(u,v) = |u - v|$ (§**3.5**).

3.11 应用 **RSNTO** 到例 **3.3.**

3.12 应用 **RSNTO** 到例 **3.6,** 并求得比例 **3.6** 中更精确的 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的近似值.

第四章　多元分布的代表点

在前几章，我们讨论了一个有界闭区域 D 上的 NT-nets 在统计中的许多应用，一个 NT-nets 中的点可以看作分布 $U(D)$ 的代表点. 设 $F(\boldsymbol{x})$ 为一已知的多元连续分布函数，本章将考虑在如下两个准则下的代表点： F- 偏差 (或 **Kolmogorov-Smirnov 距离**) 及均方差 (MSE) 来度量代表性的程度. 本章我们将给出许多有用分布的两类代表点及代表点在概率计算与几何概率方面的应用.

§ 4.1　F-偏差准则

令 $F(\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_s)$ 为一 s 维连续分布函数，而 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x}_k,\ k = 1,\cdots,n\}$ 为 R^s 中的一个 n 点集合. 公式 (1.2.2) 所定义的 F- 偏差 $D_F(n,\mathcal{P})$ 是 $\mathcal{P}$ 作为 $F(\boldsymbol{x})$ 代表点的一个量度. 如果 n 点集 $\mathcal{P}^* = \{\boldsymbol{x}_k,\ k = 1,\cdots,n\}$ 满足条件

$$D_F(n,\mathcal{P}^*) = \min_{\mathcal{P}} D_F(n,\mathcal{P}), \tag{4.1.1}$$

其中 $\mathcal{P}$ 遍历所有 R^s 中的 n 点集， $\mathcal{P}^*$ 就称为 $F(\boldsymbol{x})$ 的 **c.d.f. 代表点**.

当 $s=1$, 连续分布的 c.d.f. 代表点在前面例 1.4 已经找出来了. 为完备起见，这里正式抄录如下.

定理 4.1　令 $F(x)$ 为某个一元连续分布函数，它的逆函数为 $F^{-1}(y)$. 则集合

$$Q_F = \{F^{-1}((2i-1)/2n),\ i = 1,\cdots,n\} \tag{4.1.2}$$

是 $F(X)$ 的一个 n 点 c.d.f. 代表点集. 它的 F- 偏差为 $1/2n$.

当 $s>1$, 要找到满足 (4.1.1) 的 n 点集 $\mathcal{P}^*$ 并不是件容易的工作; 就算是最简单的分布 — C^s 上的均匀分布, 情况也是一样. 所以我们退而求其次, 希望能找到一些低 F- 偏差的 n 点集, 用以作为代表点. "低偏差" 是什么意思? 我们在定义 1.3 中给出了一些建议. 我们也可以类似地给出下面的定义.

定义 4.1 令 N 为自然数的一个无穷子集合, 而 $\{\mathcal{P}_n, n\in N\}$ 是 R^s 中的一个点集序列, 其中 $\mathcal{P}_n$ 的点数目是 n. 如果

$$D_F(n,\mathcal{P}_n)=o(n^{-\frac{1}{2}}),$$

则 $\{\mathcal{P}_n\}$ 称为 $F(\boldsymbol{x})$ 的一串 **代表点集序列**. 如果对于任意给定 $\varepsilon>0$ 都有

$$D_F(n,\mathcal{P}_F)=O(n^{-1+\varepsilon}),$$

则 $\{\mathcal{P}_n\}$ 叫做 $F(\boldsymbol{x})$ 的一串 **好代表点集序列**.

当 $F(\boldsymbol{x})$ 是均匀分布 $U(C^s)$ 的时候, 我们曾介绍几个有效的方法来得到好代表点集序列. 对于由独立变量组合而成的多元分布, 可以利用各独立变量分布函数的逆函数来得到多元分布的代表点集序列.

定义 4.2 设 T 为 R^s 中一个一对一连续变换, $\boldsymbol{y}=T(\boldsymbol{x})$, 而 $F(\boldsymbol{x})$ 和 $G(\boldsymbol{y})$ 分别为 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的分布函数. 如果对于所有点集 $\mathcal{P}=\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$, 均有

$$D_F(n,\mathcal{P})=D_G(n,\mathcal{P}^*), \tag{4.1.3}$$

其中 $\mathcal{P}^*=\{\boldsymbol{y}_k=T(\boldsymbol{x}_k),\ k=1,\cdots,n\}$, 则称 T 为 **偏差不变变换** (**DPT**).

例 4.1 设 $F(\boldsymbol{x})$ 为一连续多元分布函数, 它满足

$$F(\boldsymbol{x})=F(x_1,\cdots,x_s)=\prod_{i=1}^{s}F_i(x_i), \tag{4.1.4}$$

其中 $F_i(x_i)(i=1,\cdots,s)$ 分别是各单变量的分布函数. 若 $\{\boldsymbol{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{ks}),k=1,\cdots,n\}$ 是 C^s 中具有偏差 d 的一个 n 点集,

则点集

$$\{\boldsymbol{x}_k=(F_1^{-1}(c_{k1},\cdots,F_s^{-1}(c_{ks})),\ k=1,\cdots,n\} \tag{4.1.5}$$

对于 $F(\boldsymbol{x})$ 的 F- 偏差是 d (例 1.5). 所以这里分布函数的独立逆变换是个 DPT.

例 4.2 设 $\boldsymbol{x}$ 是 R^s 上的一个随机向量，而

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}$$

是它的线性变换，其中 $\boldsymbol{a}$ 是个常数向量，$\boldsymbol{B}$ 则是个正对角矩阵. 这也是个 DPT, 其证明留给读者.

但是对大多数多元分布，没有独立结构，我们如何找到代表点呢？注意我们已用随机表示法找到 $U(A_s), U(B_s), U(U_s), U(T_s)$ 与 $U(V_s)$ 的低偏差代表点. 为方便计，我们宁可用 "NT-nets" 或对各种均匀分布用 "均匀散布" 来代替代表点. 代表点则用于其他分布.

假定 $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_s)$ 的分布函数是 $F(\boldsymbol{x})$, 而且有如下的表示

$$\boldsymbol{x}\stackrel{d}{=}\boldsymbol{x}(\boldsymbol{\phi})=\boldsymbol{x}(\phi_1,\cdots,\phi_t), \tag{4.1.6}$$

其中 $\phi_1,\cdots,\phi_t$ 是独立随机变量并有连续分布函数. 由 (4.1.5) 我们可得到 R^t 上具有低偏差 d 的点集 $\{\boldsymbol{y}_k, k=1,\cdots,n\}$, 于是点集

$$\{\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}(\boldsymbol{y}_k),\ k=1,\cdots,n\} \tag{4.1.7}$$

可以被考虑作为 $F(\boldsymbol{x})$ 的代表点集；此处 $\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$ 具有伪 F- 偏差 d (见定义 1.9).

在 §1.5 我们曾经论证过 (4.1.7) 所产生的代表点集一般代表性良好. 不过要注意，(4.1.6) 的表示法不止一个，因而对同一个 $F(\boldsymbol{x})$, 可以有不同的产生代表点的方法，正如在 §1.6 所讨论的例子 $U(U_s)$ 与 $U(T_s)$. 蒙特卡罗模拟法也同样会碰到这些情况. 即不同的方法将有不同的效率，但没有一个公认的准则去判断哪个

方法最好．但我们很有兴趣地注意到很多有用的多元分布都有下面的随机表示：

$$\boldsymbol{x} \stackrel{d}{=} R\boldsymbol{y} \tag{4.1.8}$$

其中 $\boldsymbol{x} \sim F(\boldsymbol{x})$, 为一 s 维多元分布， $\boldsymbol{y} \sim U(D)$, D 为 R^s 中的 $(s-1)$ 维有界区域，且 R 与 $\boldsymbol{y}$ 独立． R 是个正的随机变量，如果在 D 上已生成一个 NT-nets, 我们建议利用 R 与 $\boldsymbol{y}$ 的独立性来生成 $F(\boldsymbol{x})$ 的代表点．

第一步． 产生 C^s 上的 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, \cdots, c_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$.

第二步． 以 F_R^{-1} 表示随机变量 R 的分布函数的逆函数．计算 $r_s = F_R^{-1}(c_{ks}), k = 1, \cdots, n$.

第三步． 用 $\boldsymbol{c}_k$ 的前 $(s-1)$ 分量元素产生 D 上的 NT-net $\{\boldsymbol{y}_k, k = 1, \cdots, n\}$.

第四步． 最后 $\{\boldsymbol{x}_k = r_k\boldsymbol{y}_k, k = 1, \cdots, n\}$ 是 $F(\boldsymbol{x})$ 的代表点集．

这个方法称为 NTSR 算法．在下一节我们将利用这个算法得到许多多元分布的代表点集，其相应的 $D = U_s$ 或 T_s.

§ 4.2 一些多元分布的代表点

本节我们利用 NTSR 算法得出某些常用的多元分布的代表点；它们包括球分布、多元 l_1 范数分布和 Liouville 分布等等．

4.2.1 球对称和椭球对称分布

在第 2.2 节，我们对球对称和椭球对称分布曾给出定义．随机向量 $\boldsymbol{x}$ 具有球对称分布的意思是它可以作出如下的分解

$$\boldsymbol{x} \stackrel{d}{=} R\boldsymbol{u}^{(s)}, \tag{4.2.1}$$

其中 R 是个独立于 $\boldsymbol{u}^{(s)}$ 的非负随机变量而 $\boldsymbol{u}^{(s)} \sim U(u_s)$(定理 2.2).

我们已经在 §1.5 讨论了生成 U_s 上一个 NT-net 的球坐标变换方法. 下节我们将介绍一个基于 C^{s-1} 上一个 NT-net 来生成 U_s 上 NT-net 的更有效的方法. 将 NTSR 用于 (4.2.1) 我们有下面生成球分布的代表点的程序：

第一步 在 C^s 上生成一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k, k=1,\cdots,n\}$.

第二步 基于 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 的前 $s-1$ 个分量在 U_s 上生成一个 NT-net $\{\boldsymbol{y}_k, k=1,\cdots,n\}$.

第三步 记 (4.2.1) 中的 R 的 c.d.f. 为 $F_R(r)$, 计算

$$r_k = F_R^{-1}(c_{ks}), \qquad k=1,\cdots,n. \tag{4.2.2}$$

第四步 最后 $\{\boldsymbol{x}_k : r_k\boldsymbol{y}_k, k=1,\cdots,n\}$ 是 (4.2.1) 给出的 $\boldsymbol{x}$ 的代表点.

为方便计，我们在下面列出一些生成不同的球对称分布的 $F_R(r)$.

(a) B_s 上的均匀分布

如果 $\boldsymbol{x}$ 具有 B_s 上的均匀分布，它的生成元 R 的 c.d.f. 是

$$F_R(r) = \begin{cases} 0, & r \le 0, \\ r^s, & 0 < r < 1, \\ 1, & r \ge 1, \end{cases} \tag{4.2.3}$$

((2.2.24)).

(b) 标准多元正态分布

设 $\boldsymbol{x} \sim N_s(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_s)$, 那么生成元 R 的分布函数是自由度 s 的 Chi- 分布

$$F_R(r) = \int_0^r \frac{t^{s-1}e^{-t^2/2}}{\Gamma(s/2)2^{s/2-1}}\, dt.$$

不过，这个分布有更为简单的产生代表点的方法. 由于多元正态分布可以分解为：

$$F(\boldsymbol{x}) = \prod_{i=1}^{s} \Phi(x_i),$$

其中 $\Phi(x)$ 是 $N(0,1)$ 的分布函数. 利用例 4.1 的办法，我们直接可以得到代表点

$$x_k = (\Phi^{-1}(c_{k1}), \cdots, \Phi^{-1}(c_{ks})), \qquad k = 1, \cdots, n,$$

其中 $\{c_k = (c_{k1}, \cdots, c_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$ 是 C^s 上的一个 NT-net.

(c) 对称 Kotz 型分布

这类分布曾在例 2.2 定义过. 它对应的 R 的分布函数可由 (2.2.4) 与 (2.2.14) 得到:

$$F_R(r) = \frac{2tb^{(2N+s-2)/(2t)}}{\Gamma((2N+s-2)/(2t))} \int_0^r u^{2N+s-3} e^{-bu^{2t}}\, du. \tag{4.2.4}$$

(d) 对称多元 Pearson VII 型分布

参照例 2.3, 生成元平方 $u = R^2$ 的 p.d.f. 可由 (2.2.4) 和 (2.2.15) 得到:

$$\frac{1}{B(s/2, N-s/2)} m^{-s/2} u^{s/2-1} (1+u/m)^{-N}, \qquad u > 0, \tag{4.2.5}$$

也就是说， R^2/m 具有 beta II 型分布，它的参数分别是 $s/2$ 和 $N-s/2$. 因此可以用 beta 分布函数来找 R 的代表点. 下面将会解释.

附注 4.1 单变量 B_2 具有参数为 α 和 β 的 **beta II 型分布**的意思，是它的 p.d.f. 由下式给出:

$$\frac{1}{B(\alpha, \beta)} b_2^{\alpha-1} (1+b_2)^{-(\alpha+\beta)}, \qquad b_2 > 0, \tag{4.2.6}$$

我们记以 $B_2 \sim B_eII(\alpha, \beta)$. 容易看出，若 B_2 具有 $BeII(\alpha, \beta)$, 则 $B_1 = B_2/(1+B_2)$ 具有参数 α, β 的 beta 分布 $B_e(\alpha, \beta)$.

根据以上附注，我们得到

$$B \equiv \frac{R^2/m}{1+R^2/m} = \frac{R^2}{m+R^2} \sim Be\left(\frac{s}{2}, \frac{N-s/2}{2}\right), \tag{4.2.7}$$

其中 R^2 的分布密度是 (4.2.5). 令 $G(b)$ 为 beta 分布 $Be(\frac{s}{2}, \frac{N-s/2}{2})$ 的分布函数，并令 $b_k = G^{-1}(c_{ks})$. 由 (4.2.7) 得 $R = (mB/(1-B))^{1/2}$, 于是公式 (4.2.2) 中的 r_k 就是

$$r_k = \left(\frac{mb_k}{1-b_k}\right)^{1/2}. \tag{4.2.8}$$

前面例 2.3 曾提及，多元 t 分布和多元 Cauchy 分布都是对称多元 Pearson VII 型分布的特殊情况. 因此，这两种分布的代表点可用上述方法得出.

(e) 对称多元 Pearson II 型分布

这类分布在例 2.4 定义过. 由 (2.2.4) 和 (2.2.20) 得出生成元 R 的 p.d.f.:

$$\frac{2\Gamma(s/2+m+1)}{\Gamma(s/2)\Gamma(m+1)} r^{s-1}(1-r^2)^m, \qquad 0 \le r \le 1, \tag{4.2.9}$$

因而 $u = R^2$ 的 p.d.f. 是

$$\frac{2\Gamma(s/2+m+1)}{\Gamma(s/2)\Gamma(m+1)} u^{s/2-1}(1-u)^m, \qquad 0 \le u \le 1 \tag{4.2.10}$$

也就是说， R^2 具有 beta 分布 $Be(s/2, m+1)$. 于是， R 的代表点可用 beta 分布再加以平方根的调整产生出来.

最后来看看怎样得到椭球对称分布的代表点. 假如随机向量 $\boldsymbol{y} \sim S_s(g)$, 那么从定义 2.1 得知

$$\boldsymbol{x} \stackrel{d}{=} \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{y} \ \sim \ EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g),$$

其中 $\boldsymbol{\mu}: s\times 1$, 和 $\boldsymbol{\Sigma} > 0: s\times s$. 若 $\{\boldsymbol{y}_k\}$ 是 $S_s(g)$ 的代表点集，那么椭球对称分布 $EC_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g)$ 的代表点 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 可用下面公式算出：

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{y}_k, \qquad k = 1, \cdots, n. \tag{4.2.11}$$

其中 $\Sigma^{1/2}$ 是任何一个满足 $\Sigma = AA'$ 的 $s \times s$ 矩阵 A, 不必一定是 Σ 的正方根阵. 最方便的 A 应该是正对角元的上三角矩阵，称为 Cholesky 根. 选用这个 A, 我们把 (4.2.11) 写成

$$x_k = \mu + Ay_k, \qquad k = 1, \cdots, n.$$

4.2.2 l_1 范对称分布

定义 4.3 一个 s 维随机向量具有 **多元 l_1 范对称分布** 的条件是

$$x \overset{d}{=} Ru, \tag{4.2.12}$$

其中 $R \geq 0$ 独立于 u, 而且 $u \sim U(T_s)$ (方开泰与方碧琪 (1988) 或方开泰， Kotz 与吴启宏 (1990)). 若 R 具有 gamma 分布 $Ga(s,1)$ (§2.6), 则 (4.2.12) 中 x 的各分量为 i.i.d. 且每一分量有标准指数分布. 因此，多元 l_1 范对称分布具有许多与指数分布相似的性质，而可以看作指数分布的多元化.

因为 (4.2.12) 具有 (4.1.8) 的结构，我们可以用 NTSR 算法生成多元 l_1 范对称分布的代表点集. 具体地说，令 $F_R(x)$ 为 (4.2.12) 中 R 的分布函数而 $F_R^{-1}(x)$ 是它的逆函数, 给定 C^s 上的一个 NT-net $\{c_k = (x_{k1}, \cdots, c_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$, 则 (4.2.12) 中 x 的代表点集 $\{x_k = (x_{k1}, \cdots, x_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$ 可用下面公式得到 (1.5.33):

$$\begin{aligned} x_{ki} &= r_k \prod_{j=1}^{i-1} c_{kj}^{\frac{1}{s-j}} (1 - c_{ki}^{\frac{1}{s-i}}), \qquad i = 1, \cdots, s-1, \\ x_{ks} &= r_k \prod_{j=1}^{s-1} c_{kj}^{\frac{1}{s-j}}, \quad r_k = F_R^{-1}(c_{ks}), \quad k = 1, \cdots, n. \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

为节省计算时间，可以用递推公式 (4.2.19) 来求得 $\{x_k\}$.

4.2.3 多元柳维尔分布

定义 4.4 一个 s 维随机向量 x 具有 **多元柳维尔 (Liouville) 分布** 的意思是

$$\boldsymbol{x} \stackrel{d}{=} R\boldsymbol{y}, \tag{4.2.14}$$

其中 R 是个独立于 $\boldsymbol{y}$ 的正随机变量，而 $\boldsymbol{y}$ 则具有狄里克里 (Dirichlet) 分布 $D_s(\alpha_1, \cdots, \alpha_s)$ (定义 2.3). 若 F_R 是 R 的分布函数，我们记 $\boldsymbol{x} \sim L(\alpha_1, \cdots, \alpha_s;\ F_R)$.

当 $\alpha_1 = \cdots = \alpha_s = 1$ 时，$\boldsymbol{y}$ 的分布蜕化为 $U(T_s)$. 因此，多元 l_1 范对称分布是多元 Liouville 分布的特殊类别 (方开泰， Kotz 与吴启宏 (1990), 第六章).

由于 (4.2.14) 符合 (4.1.8) 的结构，只要能得到 Dirichlet 分布的代表点集，我们就可以用 NTSR 算法得到 Liouville 分布的代表点集. 至于 Dirichlet 分布代表点集，当然可用 (2.6.3) 来生成. 具体地说，设 F_j 为 Gamma 分布 $Ga(\alpha_j)$ 的分布函数，$j = 1, \cdots, s$, 再设 $\{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, \cdots, c_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$ 为 C^s 上一个 NT-net. 令 $b_{k_i} = F_i^{-1}(c_{ki})$, 其中 F_i^{-1} 是 F_i 的逆函数，则 Dirichlet 分布的代表点集可用下面公式给出：

$$y_{ki} = \frac{b_{ki}}{b_{k1} + \cdots + b_{ks}}, \quad i = 1, \cdots, s, \quad k = 1, \cdots, n. \tag{4.2.15}$$

注意 $\boldsymbol{y}$ 是单纯形 T_s 的点，有效维数实际上是 $(s-1)$, 但我们用了 s 个独立随机量. 当 n 较小时这个表示方法很可能不那么好 (例 1.11 和例 1.12). 因此，有必要另找更好的方法.

设 $B_1, \cdots, B_{s-1}$ 互相独立，而且 B_i 具有 beta 分布 $Be(\sum_{j=1}^{i} \alpha_j, \alpha_{i+1})$, $i = 1, \cdots, s-1$, 那么任一个具有 Dirichlet 分布的随机向量 $\boldsymbol{y} \sim D_s(\alpha_1, \cdots, \alpha_s)$ 可作如下的随机分解 (2.6.6):

$$(Y_1, \cdots, Y_s) \stackrel{d}{=} \left(\prod_{i=1}^{s-1} B_i, (1 - B_1)\prod_{i=2}^{s-1} B_i, \cdots, 1 - B_{s-1}\right). \tag{4.2.16}$$

从这个分解，我们得到比较好的产生 Liouville 分布代表点的方法如下.

令 F_i 为 beta 分布 $Be(\sum_{j=1}^{i} \alpha_j, \alpha_{i+1})$ 的分布函数，$i = 1, \cdots, s$, 而 F_R 为 (4.2.14) 中生成元 R 的分布函数. 给定 C^s 上的

一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k, \ k=1,\cdots,n\}$, Liouville 分布 $L(\alpha_1,\cdots,\alpha_s;F_R)$ 的一个代表点集 $\{\boldsymbol{x}_k, k=1,\cdots,n\}$. 可用下面公式得出：

$$
\begin{aligned}
&x_{ki} = r_k(1-b_{k,i-1})\prod_{j=i}^{s-1} b_{kj}, \\
&r_k = F_R^{-1}(c_{ks}), \qquad b_{k0}=0, \\
&b_{ki} = F_i^{-1}(c_{ki}), \qquad i=1,\cdots,s-1, \ k=1,\cdots,n.
\end{aligned}
\tag{4.2.17}
$$

附注 4.2 当 $\alpha_1=\cdots=\alpha_s=1$, Dirichlet 分布 $D_s(1,\cdots,1)$ 退化为单纯形 T_s 上的均匀分布，于是 (4.2.16) 中的 B_i 具有 beta 分布 $Be(i,1), i=1,\cdots,s-1$. 由于 $Be(i,1)$ 的 p.d.f. 是 $i^{-1}x^{i-1}(0<x<1)$, 而分布函数则是

$$F_i(x)=x^i, \quad 0<x<1.$$

再加上生成元 R 恒等于 1, 于是 (4.2.17) 化为

$$
\left\{
\begin{aligned}
&x_{k1} = \prod_{j=1}^{s-1} c_{kj}^{1/j}, \\
&x_{ki} = (1-c_{k,i-1}^{1/(i-1)})\prod_{j=i}^{s-1} c_{kj}^{1/j}.
\end{aligned}
\right.
\tag{4.2.18}
$$

$$i=2,\cdots,s, \quad k=1,\cdots,n.$$

这也是产生单纯形 T_s 的 NT-net 的另一个方法. 比较之下，(4.2.18) 和 (1.5.33) 本质上是一样的.

最好用下面的递推公式来计算 (4.2.18):

(a) 命 $g_{ks}=1$ 及 $g_{k0}=0, k=1,\cdots,n$.

(b) 当 $k=1,\cdots,n$ 时，递推地计算

$$g_{kj}=g_{k,j+1}c_{kj}^{1/j}, \qquad j=s-1,\cdots,1. \tag{4.2.19}$$

(c)

$$x_{kj}=\sqrt{g_{kj}-g_{k,j-1}}, \qquad j=1,\cdots,s, \quad k=1,\cdots,n.$$

NTSR 算法可以类似地用于 α-对称分布，广义对称 Dirichlet 分布，旋转不变分布 (方开泰与 Anderson (1990)) 及加性若吉斯蒂克分布 (§2.6).

§ 4.3 生成 U_s 上数论网格的一个有效方法

均匀分布 $U(U_s)$ 是球与椭球分布及方向统计量的基础. 我们在 §1.5.3 中介绍了利用球坐标变换 (SCT) 生成 U_s 上的 NT-net 方法. 在这个方法中，需要大量计算分布函数

$$F_j(\phi) = \frac{\pi}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{s-j}{2}\right)} \int_0^{\phi} (\sin \pi t)^{s-j-1} dt, \qquad j = 1, \cdots, s \tag{4.3.1}$$

的逆函数. 附录 B.2 中指出 $F_j(\phi)$ 及其逆函数可以由非完全 beta 函数表示出来. 因得到非完全 beta 函数的一个值的计算时间不可忽略，当 n 较大时，需要较长的计算时间才能得到 U_s 上大小为 n 的一个 NT-net. 为了节省计算时间我们常常用 Box-Muller 变换生成 s- 维标准正态变量 $\boldsymbol{x}$, 然后得到均匀分布 $\boldsymbol{x}/\|\boldsymbol{x}\|$ (例 1.11). 但是当 n 较小时，这个方法得到的集合的均匀性低于前述方法. 本节我们将介绍一个生成 U_s 上的 NT-net 的程序. 由这一方法得到的集合的均匀性不比由 SCT 方法得到的集合差，而计算时间只比 Box-Muller 变换法略长一点.

引理 4.1 假设 $\boldsymbol{u} \sim U(U_s)$ 并将 $\boldsymbol{u}$ 分拆成 m 部分

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_1 \\ \cdots \\ \boldsymbol{u}_m \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{u}_i : t_i \times 1, \quad t_1 + \cdots + t_m = s.$$

则

$$\boldsymbol{u} \stackrel{d}{=} \begin{pmatrix} d_1 \boldsymbol{u}^{(1)} \\ \cdots \\ d_m \boldsymbol{u}^{(m)} \end{pmatrix}, \tag{4.3.2}$$

此处

(1) $\boldsymbol{u}^{(j)} \sim U(U_{t_j})$, $j = 1, \cdots, m$.

(2) $(d_1, \cdots, d_m)$, $\boldsymbol{u}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{u}^{(m)}$ 相互独立.

(3) $d_j > 0$, $j = 1, \cdots, m$, 及 $(d_1^2, \cdots, d_m^2) \sim D_m(t_1/2, \cdots, t_m/2)$. (方开泰， Kotz 与吴启宏 (1990) 定理 2.6).

特别当 $s = 2m$ 为偶数及 $t_1 = \cdots = t_m = 2$ 时，我们有 $\boldsymbol{u}^{(j)} \sim U(U_2)$ 及 $(d_1^2, \cdots, d_m^2) \sim D_m(1, \cdots, 1) = U(T_m)$, 所以随机表示 (4.3.2) 可以表成下面更具体的形式

$$\boldsymbol{u} \stackrel{\mathrm{d}}{=} \begin{pmatrix} d_1 \cos(2\pi\phi_1) \\ d_1 \sim \sin(2\pi\phi_1) \\ d_2 \cos(2\pi\phi_2) \\ d_2 \sim \sin(2\pi\phi_2) \\ \cdots \\ d_m \cos(2\pi\phi_m) \\ d_m \sim \sin(2\pi\phi_m) \end{pmatrix}, \tag{4.3.3}$$

此处

(1) $(d_1^2, \cdots, d_m^2) \sim U(T_m)$ 及 $d_j > 0$, $j = 1, \cdots, m$.

(2) $(\phi_1, \cdots, \phi_m)$ 及 $(d_1, \cdots, d_m)$ 相互独立.

(3) $(\phi_1, \cdots, \phi_m) \sim U(C^m)$.

由这一事实及 (4.2.19), 我们建议下面的程序

第 1 步 在 C^{s-1} 上生成一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, \cdots, c_{k,s-1}), k = 1, \cdots, n\}$.

第 2 步 置 $g_{km} = 1$ 及 $g_{k0} = 0, k = 1, \cdots, n$.

第 3 步 当 $k = 1, \cdots, n$ 时，递推地计算

$$g_{kj} = g_{k,j+1} c_{kj}^{1/j}, \qquad j = m-1, m-2, \cdots, 1. \tag{4.3.4}$$

第 4 步 计算 $d_{kl} = \sqrt{g_{kl} - g_{k,l-1}}$ 及

$$\begin{aligned} x_{k,2l-1} &= d_{k,l} \cos(2\pi c_{k,m+l-1}), \qquad & l = 1, \cdots, m, \\ x_{k,2l} &= d_{k,l} \sin(2\pi c_{k,m+l-1}), \qquad & k = 1, \cdots, n, \end{aligned} \tag{4.3.5}$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k = (x_{k1}, \cdots, x_{ks}), k = 1, \cdots, n\}$ 就是 U_s 上的一个 NT-net.

当 $s=2t+3(t\geq 0)$ 为奇数时，我们在引理 4.1 中选取 $t_1=3$, $t_2=\cdots=t_m=2$ 及 $m=t+1$, 则得 $(d_1^2,\cdots,d_m^2)\sim D_m(\frac{3}{2},1,\cdots,1)$, 所以由 (4.2.16) 得

$$(d_1^2,\cdots,d_m^2)\stackrel{d}{=}\left(\prod_{i=1}^{t}B_i,(1-B_1)\prod_{i=2}^{t}B_i,\cdots,1-B_t\right), \quad (4.3.6)$$

此处 $B_1,\cdots,B_t$ 相互独立, $B_i\sim Be((2i+1)/2,1)$, $i=1,\cdots,t$. 易见 B_i 的 c.d.f. 为 $x^{(2i+1)/2}$, $0<x<1$. 随机表示 (4.3.2) 可以写成

$$\boldsymbol{u}\stackrel{d}{=}\begin{pmatrix} d_1(1-2\phi_1)\\ d_1\sqrt{\phi_1(1-\phi_1)}\cos(2\pi\phi_2)\\ d_1\sqrt{\phi_1(1-\phi_1)}\sin(2\pi\phi_2)\\ d_2\cos(2\pi\phi_3)\\ d_2\sin(2\pi\phi_3)\\ \cdots\\ d_m\cos(2\pi\phi_{m+1})\\ d_m\sin(2\pi\phi_{m+1}) \end{pmatrix}, \quad (4.3.7)$$

此处

(1) $(d_1^2,\cdots,d_m^2)\sim D_m(\frac{3}{2},1,\cdots,1)$ 并有随机表示 (4.3.6).

(2) $(\phi_1,\cdots,\phi_{m+1})$ 与 $(d_1^2,\cdots,d_m^2)$ 相互独立.

(3) $(\phi_1,\cdots,\phi_{m+1})\sim U(C^{m+1})$.

因此我们有下面的程序

第 1 步 在 $C^{(s-1)}$ 上生成一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{k,s-1}), k=1,\cdots,n\}$.

第 2 步 置 $m=(s-1)/2$, $g_{km}=1$ 及 $g_{k0}=0$, $k=1,\cdots,n$.

第 3 步 当 $k=1,\cdots,n$ 时，递推地计算

$$g_{kj}=g_{k,j+1}c_{kj}^{2/(2j+1)}, \qquad j=m-1,m-2,\cdots,1.$$

第 4 步 计算

$$d_{kj}=\sqrt{g_{kj}-g_{k,j-1}}, \qquad j=1,\cdots,m, \quad k=1,\cdots,n.$$

第 5 步 当 $k=1,\cdots,n$ 时，计算

$$
\begin{aligned}
x_{k1} &= d_{k1}(1-2c_{km}),\\
x_{k2} &= d_{k1}\sqrt{c_{km}(1-c_{km})}\cos(2\pi c_{k,m+1}),\\
x_{k3} &= d_{k1}\sqrt{c_{km}(1-c_{km})}\sin(2\pi c_{k,m+1}),\\
x_{k,2l} &= d_{kl}\cos(2\pi c_{k,2l}),\\
x_{k,2l+1} &= d_{kl}\sin(2\pi c_{k,2l}), \qquad l=2,\cdots,m.
\end{aligned}
$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k=(x_{k1},\cdots,x_{ks}),\ k=1,\cdots,n\}$ 为 U_s 上的一个 NT-net. 以上两个算法是 Tashiro (1977) 与方开泰，王元与黄开林 (1992) 独立给出的，我们称之为 **TFWW 算法**. 由方开泰，王元与黄开林给出的数值结果表明 TFWW 程序所需的计算时间大大低于 SCT 所需的时间，而且由 TFWW 与 SCT 生成的 U_s 上的 NT-nets 具有同样的均匀度. 因此 TFWW 程序是值得推荐的.

§ 4.4 MSE 准则 (一维情形)

命 X 为一个随机变数，它有 p.d.f. $p(x)$ 与 $\sigma^2=\mathrm{Var}(X)$. 对于任 n 个数 $-\infty<x_1<x_2<\cdots<x_n<\infty$, 则 n- 级量化 $Q_n(\cdot)$ 由下面的阶梯函数

$$
Q_n(x)=x_k,\quad \text{if}\quad a_k<x\le a_{k+1},\quad k=1,\cdots,n, \tag{4.4.1}
$$

来定义，此处

$$
a_1=-\infty,\ a_{n+1}=\infty,\ a_k=(x_k+x_{k-1})/2,\ k=2,\cdots,n
$$

当 $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)'$ 给定时，我们用下面的均方差 (MSE)

$$
\begin{aligned}
\mathrm{MSE}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{MSE}(x_1,\cdots,x_n) &= \frac{1}{\sigma^2}E(X-Q_n(X))^2\\
&= \frac{1}{\sigma^2}\int_{-\infty}^{\infty}\min_i (x-x_i)^2 p(x)dx\\
&= \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\int_{a_i}^{a_{i+1}}(x-x_i)^2 p(x)dx
\end{aligned} \tag{4.4.2}
$$

来度量 X 与 $Q_n(X)$ 之间的歪曲.

令

$$TR_n = \{(x_1, \cdots, x_n) : x_1 < x_2 < \cdots < x_n\}.$$

最优量化 $Q_n^*(X)$ 使 MSE($\boldsymbol{x}$) 达极小，即若 $\boldsymbol{x}^* \in TR_n$ 且

$$\text{MSE}(\boldsymbol{x}^*) = \min_{\boldsymbol{x} \in TR_n} \text{MSE}(\boldsymbol{x}),$$

则 $Q_n^*(X)$ 就是 $\boldsymbol{x}^*$ 对应的 n- 级量化. 我们称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 X (或 $p(x)$) 的 **均方差代表点** (或 mse 代表点， mse-rep-points). 在很多领域中都有需要求出均方差代表点的问题，如信息论，聚类分析，量化理论，标准化及随机模拟理论 (Cox (1957), Bofinger (1970), Anderberg (1973) 及方开泰与贺曙东 (Fang and He (1982)). 例如，命 $F(x)$ 为一个国家成年男子身高的 c.d.f. 假定对于所有成年男子，我们要设计三种不同尺寸 (S, M, L) 的裤子. 如何选择能够很好代表总体的三种模型呢？我们建议选择 $F(x)$ 的三个均方差代表点作为型号的身高. Max (1960), Lloyd (1982), 方开泰与贺曙东 (Fang and He (1982)) 及 Cambanis 与 Gerr (1983) 建议了寻找均方差代表点的数值方法. 他们的方法本质上是一致的. 不失一般性，我们可以假定 $\sigma = 1$.

命 $\{x_{n1}, x_{n2}, \cdots, x_{nn}\}$ $(n = 2, 3, \cdots)$ 为 $p(x)$ 的均方差代表点序列，并命

$$L_n = L(x_{n1}, \cdots, x_{nn}) = \text{MSE}(x_{n1}, \cdots, x_{nn})$$

为 TR_n 上点的 MSE 的极小. 则下面事实易于验证：

(a) 最优量化 $Q_n(X)$ 的概率分布为

$$P(Q_n(X) = x_{ni}) = p_{ni},$$

此处

$$p_{n1} = \int_{-\infty}^{(x_{n1}+x_{n2})/2} p(x)\,dx,$$

$$p_{ni} = \int_{(x_{n,i-1}+x_{ni})/2}^{(x_{ni}+x_{n,i+1})/2} p(x)\,dx, \qquad i = 2, \cdots, n-1,$$

及

$$p_{nn} = \int_{(x_{n,n-1}+x_{nn})/2}^{+\infty} p(x)\,dx.$$

(b) $0 < L_{n+1} \le L_n \le 1$.

(c) 当 $n \to \infty$ 时， $L_n \to 0$.

(d)

$$\begin{aligned} &E(Q_n(X)) = E(X), \\ &\mathrm{Var}\,(Q_n(X)) = (1 - L_n)\mathrm{Var}(X), \\ &\mathrm{Var}\,(Q_n(X)) \le \mathrm{Var}\,(Q_{n+1}(X)) \end{aligned}$$

及

$$\mathrm{Var}\,(Q_n(X)) \to \mathrm{Var}\,(X) \qquad (n \to \infty).$$

(e) $E(X - Q_n(X))^2 = L_n \mathrm{Var}\,(X) \to 0 \ (n \to \infty)$.

证　由 (4.4.1) 立即得 (a). 今往证明 (b). 由于

$$\begin{aligned} L_{n+1} &= L(x_{n+1,1}, \cdots, x_{n+1,n+1}) \\ &\le L(x_{n1}, \cdots, x_{nn}, x_{nn} + 1) \le L_n, \end{aligned}$$

所以只要证明 $L_1 \le 1$ 即可. 我们有

$$L_1 = \frac{1}{\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_1)^2 p(x)\,dx,$$

它在 $x_1 = E(x)$ 达到极小. 因此 $x_{11} = E(x)$ 及 $L_1 = 1$. 我们略去了 (c), (d), (e) 的证明. □

在 (4.4.2) 中命 $\partial \mathrm{MSE}/\partial x_i = 0$, $i = 1, \cdots, n$, 我们得下面的非线性方程

$$\left\{ \begin{aligned} &f_1(\boldsymbol{x}) = \int_{-\infty}^{(x_1+x_2)/2} (x - x_1) p(x)\,dx = 0, \\ &f_2(\boldsymbol{x}) = \int_{(x_1+x_2)/2}^{(x_2+x_3)/2} (x - x_2) p(x)\,dx = 0, \\ &\cdots\cdots \\ &f_n(\boldsymbol{x}) = \int_{(x_{n-1}+x_n)/2}^{\infty} (x - x_n) p(x)\,dx = 0, \end{aligned} \right. \tag{4.4.3}$$

此处 $\boldsymbol{x} \in TR_n$. 命

$$L(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} |f_i(\boldsymbol{x})|, \qquad \boldsymbol{x} \in TR_n. \tag{4.4.4}$$

于是寻找均方差代表点的问题就等价于找一点 $\boldsymbol{x}^*$ 使 $L(\boldsymbol{x})$ 达到极小值零. 这是典型的最优化问题，它可以用 SNTO 来解决 (§3.7).

例 4.3 标准正态分布

假设 $X \sim N(0,1)$. 因为这个概率密度函数关于原点对称，所以当 n 为奇数时，$x_i^* = -x_{n+1-i}^*$, $i = 1, 2, \cdots, (n+1)/2$, 从而 $x_{(n+1)/2}^* = 0$. 因此我们只要寻求 $0 \le x_1^* < \cdots < x_s^*$, 此处 $s = [n/2]$, 于是 (4.4.3) 变成

$$\begin{cases} f_1(\boldsymbol{x}) = \phi(v) - \phi\Big(\dfrac{x_1 + x_2}{2}\Big) - x_1\Big[\Phi\Big(\dfrac{x_1 + x_2}{2}\Big) - \Phi(v)\Big] = 0, \\ f_2(\boldsymbol{x}) = \phi\Big(\dfrac{x_1 + x_2}{2}\Big) - \phi\Big(\dfrac{x_2 + x_3}{2}\Big) \\ \qquad\qquad -x_2\Big[\Phi\Big(\dfrac{x_2 + x_3}{2}\Big) - \Phi\Big(\dfrac{x_1 + x_2}{2}\Big)\Big] = 0, \\ \quad \cdots \\ f_s(\boldsymbol{x}) = \phi\Big(\dfrac{x_{s-1} + x_s}{2}\Big) - x_s\Big[1 - \Phi\Big(\dfrac{x_{s-1} + x_s}{2}\Big)\Big] = 0, \end{cases} \tag{4.4.5}$$

此处

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}, \qquad \Phi(x) = \int_{-\infty}^{x} \phi(t)\, dt$$

及

$$v = \begin{cases} 0, & \text{当 } n \text{ 为偶数}, \\ x_1/2, & \text{其它情形}. \end{cases}$$

下面的结果表明 SNTO 不仅有程序简单之优点，而且比其他一些已知方法要精密些. 命

$$L(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{s} |f_i(\boldsymbol{x})|, \qquad x \in TR_s^+, \tag{4.4.6}$$

此处

$$TR_s^+ = \{(x_1, \cdots, x_s) : 0 \le x_1 < \cdots < x_s\}.$$

寻找一个均方差代表点 $\boldsymbol{x}^*$ 的问题等价于在 TR_s^+ 上寻找 $L(\boldsymbol{x})$ 的一个极小点问题. 由标准正态分布的熟知性质可知 $\boldsymbol{x}^*$ 一定落于区域

$$TR_s^+(B) = \{(x_1, \cdots, x_s) : 0 \le x_1 < \cdots < x_s < B\}, \qquad (4.4.7)$$

之中，此处 B 为适当常数，例如当 $10 < n \le 30$ 时，我们可以取 $B = 3.5$ 而当 $n \le 10$ 时，取 $B = 2 \sim 3$. 命 $D = TR_s^+(B)$. 我们可以用 SNTO 及 $n_2 = n_3 = \cdots$ 求得均方差代表点 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似. 计算结果列于表 4.1 与 4.2 中. 在表 4.1 中，我们用 N 表示计算时用的总点数，T 表示对区域 $TR_s^+(B)$ 进行收缩的次数，$\boldsymbol{x}^{**}$ 表示由 SNTO 得到的一个均方差代表点，$\boldsymbol{x}^*$ 为由方开泰与贺曙东 (1982) 方法得到的均方差代表点. $\boldsymbol{x}^*$ 比 Max (1960) 的结果稍好一点，及 $L(\boldsymbol{x}^{**})$ 与 $L(\boldsymbol{x}^*)$ 分别表示 $L(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}^{**}$ 与 $\boldsymbol{x}^*$ 之值. 由表 4.1 可见 $\boldsymbol{x}^{**}$ 比方开泰与贺曙东 (1982) 及 Max (1960) 的结果精密. 表 4.2 给出当 $n \le 10$ 时，$\boldsymbol{x}^{**}$ 之值.

上述方法可以用于任何连续一维分布，例如庄威彪 (1991) 与 Lai (1992) 得到对数正态分布与 beta 分布的均方差代表点.

表 4.1　SNTO 与方开泰 - 贺曙东方法的比较

n	n_1	n_2	T	N	$L(\boldsymbol{x}^{**})$	$L(\boldsymbol{x}^*)$
4	114	89	20	1835	1.490E−8	3.308E−6
5	114	89	20	1835	1.490E−8	6.124E−6
6	701	199	22	4880	1.490E−8	1.305E−5
7	701	199	23	5079	1.490E−8	1.882E−5
8	1069	523	22	12,052	7.078E−8	2.424E−5
9	1069	523	22	12,052	2.235E−8	7.964E−3
10	4001	1069	22	26,450	1.576E−6	3.400E−5

表 4.2 $N(0,1)$ 的均方差代表点

n	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
4	0.452780	1.51042			
5	0.764567	1.72415			
6	0.317717	1.00011	1.89360		
7	0.560579	1.18814	2.03336		
8	0.245096	0.756014	1.34392	2.15195	
9	0.443636	0.918791	1.47639	2.25465	
10	0.199614	0.609828	1.05777	1.59125	2.34488

§ 4.5 MSE 准则 (多元情形)

我们现在考虑多元分布的均方差代表点与量化. 1982 年 3 月 IEEE Transaction on Information Theory 关于这个主题出了一个专辑.

命 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)$ 为 s- 维随机矢量, 它的 p.d.f. 为 $p(\boldsymbol{x})$ 而且 $\mathrm{Var}(X_i)=1, i=1,\cdots,s$. 文献上多元量化的定义如下:

定义 4.5 一个所谓 s- 维矢量 $\boldsymbol{x}$ 的 n-级量化 $Q=(\mathcal{Y},\mathcal{S})$ 包含 R^s 的一个输出矢量集 $\mathcal{Y}=\{\boldsymbol{y}_1,\cdots,\boldsymbol{y}_n\}$, R^s 的一个 n 个互不相交的剖分 $S=(S_1,\cdots,S_n)$ 及一个由 $Q(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}_i$ $(\boldsymbol{x}\in S_i)$ 定义的映射 $Q: R^s\to\mathcal{S}$.

当 $s>1$ 时, 我们常常称之为 **分块量化**, **矢量量化** 或 **s-维量化**. **最优 n-级量化** 为所有 n 级量化中使均方差

$$\mathrm{MSE}(Q)=\frac{1}{s}E\|\boldsymbol{x}-Q(\boldsymbol{x})\|^2, \tag{4.5.1}$$

达到最小之 n- 级量化. 最优 n 级量化所对应的 $\{\boldsymbol{y}_i\}$ 称为 $\boldsymbol{x}$ 的 **均方差代表点**.

我们易知下面关于最优量化的必要条件: 关于每个量化输出 $\boldsymbol{y}_i$, 剖分块 $S_i, i=1,\cdots,n$, 应该满足

$$S_i = \{\boldsymbol{x} : \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_i\| < \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_j\|,\ j \neq i\}, \tag{4.5.2}$$

此处我们略去 S_i 的边界；及对于每个剖分块 S_i, $\boldsymbol{y}_i$ 应为条件均值

$$\boldsymbol{y}_i = E[\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x} \in S_i]. \tag{4.5.3}$$

因为一元分布的均方差代表点可以排序，它的 MSE 可表成求和形式 (4.4.2), 其中每一项都易于计算. 多元分布不具有这一性质，所以难于求得多元分布的均方差代表点. 尽管有几个生成均方差代表点的数值方法，但尚无人证明这些方法能产生真的均方差代表点. Zador (1982) 与 Gersho (1979, 1982). 建立了渐近最优矢量量化的理论基础， Zador 发现高质量量化的渐近情况

$$\mathrm{MSE}(Q) = A(s,2)n^{-2/s}\|p(\boldsymbol{x})\|_{s/(s+r)}, \tag{4.5.4}$$

其中

$$\|p(\boldsymbol{x})\|_t = \left[\int |p(\boldsymbol{x})|^t d\boldsymbol{x}\right]^{1/t}$$

及 $A(s,2)$ 和密度函数 $p(\boldsymbol{x})$ 是独立的. Fejes Toth (1959) 指出 $A(2,2) = 5\sqrt{3}/108 \cong 0.080187537$. 当 n 不很大时， Linde, Buzo 与 Gray (1982) 建议了一个用迭代求矢量量化的 **LBG 算法**, 它基于一个 **训练序列**. 这一方法已被用于多元正态，多元 Laplace, 多元 gamma 与多元均匀分布 (Abut, Gray 与 Rebolledo (1982), Gray 与 Linde (1982) 与 Gray (1984)) 去计算低比特率 (bit-rate) 量化. 必要条件 (4.5.2) 与 (4.5.3) 给出了 LBG 算法的基础，算法细节请参看 Linde, Buzo 与 Gray (1982).

LBG 算法有很大的优越性，它是生成矢量量化的最有用的方法，但是这一方法也有许多缺点：它的最后的输出矢量仅为局部最优并且依赖于输出矢量的初始集. 训练序列与 MSE 的计算基于效率不高的蒙特卡罗方法.

不少人建议了各种初始输出矢量，Wilson (1980), Fischer 与 Dicharry (1984) 与 Fischer (1989) 给出某些几何设计. 另一方面是仅仅用于均匀分布的格子量化法. Fischer (1986) 用 Shannon 的熵理论 (1948) 给出一个信息编码定理. 这个方法仅对很高维量化才有效.

为了克服上述 LBG 程序中的缺点，方开泰，袁克海与 Bentler (1990) 用 NTM 产生初始矢量及训练序列来修改 LBG 程序.

命 $F(\boldsymbol{x})$ 为 R^s 的一个给予 c.d.f. 及随机矢量 $\boldsymbol{x} \sim F(\boldsymbol{x})$. 假定 $F(\boldsymbol{x})$ 的一组 c.d.f. 代表点可以用 C^s 上的一个 NT-net 来生成. 则 **NTLBG 程序** 如下：

第 1 步　置 $t = 0$. 基于 C^s 上一个 *glp* 集生成 $F(\boldsymbol{x})$ 的一个 c.d.f. 代表点集作为输出矢量 $\mathcal{Y}_t = \{\boldsymbol{y}_{t1}, \cdots, \boldsymbol{y}_{tn}\}$ 的初始集.

第 2 步　生成 $F(\boldsymbol{x})$ 的一个 c.d.f. 代表点集 $\{\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N\}$ 作为训练序列.

第 3 步　形成 $\{\boldsymbol{x}_k, k = 1, \cdots, N\}$ 的剖分 $\{S_j\}$, 使每一 $\boldsymbol{x}_i$ 皆对应一个 S_j 满足

$$\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{y}_{tj}\| < \|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{y}_{tk}\|, \qquad k \neq j.$$

第 4 步　计算条件样本均值 (4.5.3), 并组成一个新的输出矢量 $\mathcal{Y}_{t+1} = \{\boldsymbol{y}_{t+1,1}, \cdots, \boldsymbol{y}_{t+1,n}\}$, 此处

$$\boldsymbol{y}_{t+1,j} = \frac{1}{n_{t+1,j}} \sum_{k \in S_j} \boldsymbol{x}_k,$$

其中 $n_{t+1,j}$ 表示落于 S_j 中的 $\boldsymbol{x}_k$ 的个数. 一般说来，这些输出矢量与初始输出矢量不一样.

第 5 步　若 $\mathcal{Y}_{t+1} = \mathcal{Y}_t$, 则终止程序，并得到最终输出矢量 $\mathcal{Y}_t$, 否则命 $t = t + 1$ 再回到第 3 步.

这个过程给出了非增的 MSE, 最后收敛于一个局部最优解 $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$. NTLBG 程序主要基于聚类分析的 **$k$-平均方法**.

k-平均程序的收敛性的各种证明分别由 MacQueen (1967), Pollard (1981, 1982), Gray, Kieffer 与 Linde (1980), Gray 与 Karnin (1982) 及张尧庭与方开泰 (1982) 给出.

在下一节，将 NTLBG 用于球分布，我们可以得到一些比过去文献更好的结果.

附注 4.3 NTLBG 为什么能改进 LBG? 主要是对于输出矢量的初始集采取了 c.d.f. 代表点.

考虑最简单的情况 C^s. 在 C^s 上，我们取一个 NT-net 序列 $\mathcal{P}_n = \{\boldsymbol{x}_k^{(n)}, k=1,\cdots,n\}$ 具有偏差 $D(\mathcal{P}_n) = O(n^{-1}\log^s n)$, 其中 n 属于自然数的某子集. 则

$$\max_{\boldsymbol{x}\in C^s}\min_{1\le k\le n}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k^{(n)}\| = O(n^{-1/s}\log n),$$

其中 $\|\boldsymbol{y}\|$ 表示 $\boldsymbol{y}$ 的 l_2- 范数及

$$\text{MSE} = \frac{1}{s}\int_{C^s}\min\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k^{(n)}\|^2 d\boldsymbol{x} = O(n^{-2/s}\log^2 n)$$

它很接近 (4.5.4) 中的阶 $O(n^{-2/s})$.

如果我们用 $U(C^s)$ 的均方差代表点去产生步骤 1 的初始点结果可能较好. 但这样做仅对 s 小时有效. 见方开泰，袁克海与 Bentler (1990) 的文章.

附注 4.4 我们很自然地要用 NTM 来生成一个训练序列. 最简单的途径是用 §4.1 与 §4.2 所述的方法. 但是用来提高求积公式收敛速度的对称化方法也可以用于生成一个训练序列的问题. 例如，若 $\{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, c_{k2})\}$ 是 C^2 上的一个 NT-net, 则对称化后的 NT-net 为

$$\{(c_{k1},c_{k2}),(c_{k1},1-c_{k2}),(1-c_{k1},c_{k2}),(1-c_{k1},1-c_{k2}),k=1,\cdots,n\}.$$

由 §4.2 所介绍的方法，我们可以得到 $N_2(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I})$ 相应的代表点 $\{\boldsymbol{x}_k\}$.

§ 4.6 球对称分布的MSE代表点

本节我们将应用NTLBG来求得球对称分布的mse代表点.

例 4.4 多元正态分布.

不失一般性，我们仅考虑二元正态分布 $N_2(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$. 同法可以用于任何标准正态分布，从而可以用于一般多元正态分布. 关于生成初始点的程序已于前节叙述，在此就不重复了. 有两种方法来产生训练序列：一个基于 $N_2(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$ 有独立分量这个性质，另一个方法为用 §4.2 的方法把多元正态分布当成球对称分布. 表 4.3 给出当 $3 \le n \le 32$ 时，由第一个方法得到的 MSE, 结果表示在图 4.1 中具有"•"者，计算中若包括对称化后的点，训练样本大小为 $N = 70,844$. 我们可以看出当 $n = 6$ 时， MSE 偏大些，而点曲线光滑地下降.

表 4.3 正态分布的 mse 代表点的 MSE

n	MSE	n	MSE	n	MSE
3	0.4618390	13	0.1301080	23	0.0771025
4	0.3623600	14	0.1227065	24	0.0744985
5	0.3063070	15	0.1172445	25	0.0714630
6	0.2711950	16	0.1067880	26	0.0689305
7	0.2216000	17	0.1020085	27	0.0659590
8	0.2002523	18	0.0967775	28	0.0639525
9	0.1806665	19	0.0922800	29	0.0620685
10	0.1635840	20	0.0875885	30	0.0600280
11	0.1513470	21	0.0835925	31	0.0582365
12	0.1387165	22	0.0800835	32	0.0569415

如果我们用后一方法来生成训练序列，则与前一方法得到的结果没有什么本质差异. 例如当 $n = 8, 16$ 与 32 时， MSE 分别等于 0.200268, 0.106794 与 0.056556, 而当 $n = 6$ 时， MSE 没有

改进. 图 4.2 给出部分 mse 代表点的位置，我们见到结果是合理的. 因 $N_2(\mathbf{0},\boldsymbol{I})$ 在正交变换之下是不变的，图中的点在旋转之下有相同的 MSE.

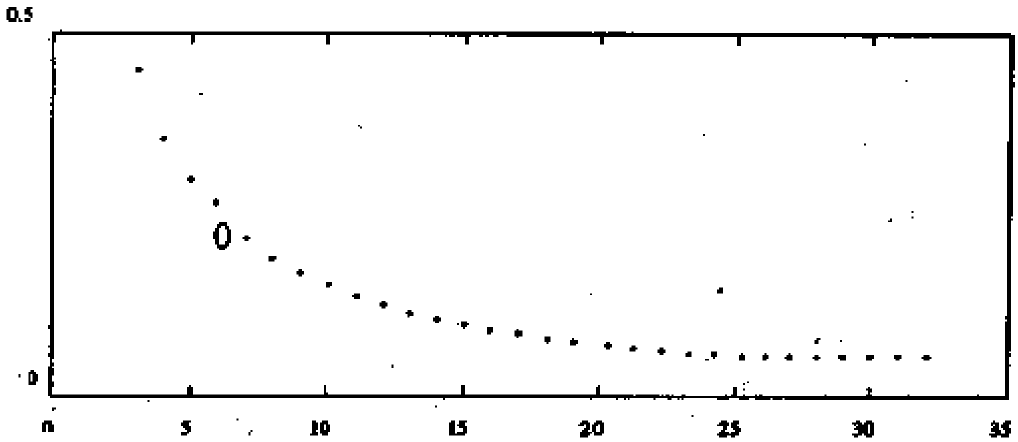


图 4.1 N_2 $(\mathbf{0},\boldsymbol{I})$ 的 mse 代表点的 MSE

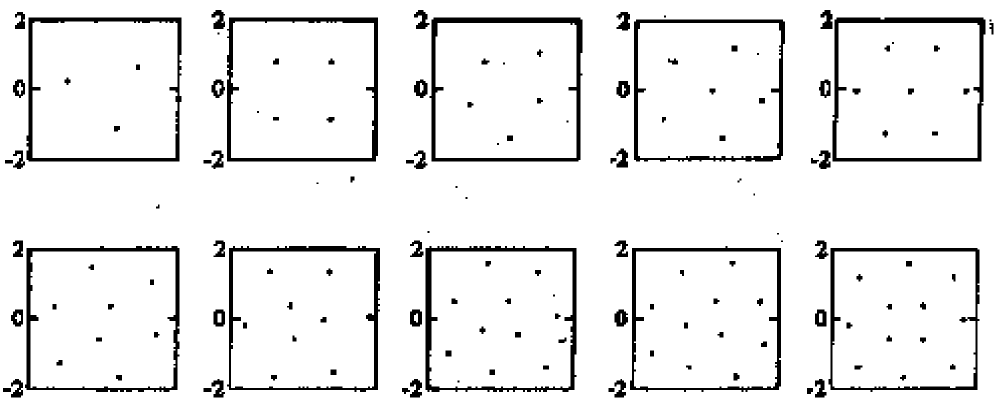


图 4.2 N_2 $(\mathbf{0},\boldsymbol{I})$ 的代表点

附注 4.5 Sharma (1978) 指出，对于对称分布，最优量化不一定也对称. 由图 4.2 可见大多数输出矢量都不对称. 但在某些情况 ($n=3,4,7,8$ 等) 有一些对称关系. 对于 $n=7$, 我们猜想一点应在原点，其他点则等分布在以 0 为中心， r 为半径的圆周上，其中 r 将于以后决定.

当 $n=7$ 时，输出矢量的极坐标的 r 值为 0, 1.43501, 1.43713, 1.43529, 1.43503, 1.43422, 1.43320. 这六个 r 的平均为 1.435647, 这可以当作 r 的估计，然后我们取 0 及半径为 $r=1.435647$ 上的六个点作为 NTLBG 程序的输出矢量的初始集. r 的最后矢量之值为 0, 1.43502, 1.43555, 1.43444, 1.43503, 1.43556, 1.43556, 它们对应的 MSE 为 0.221597. 这一技术可以用于其他情况并改进用 NTLBG 获得的结果. 例如当 $n=8$ 时，改进后的 r 值为 0.48077, 0.48110, 1.37299, 1.37299, 及 4 个 1.63416, 它所对应的 MSE 为 0.200251.

附注 4.6 王元与方开泰 (1981) 建议了去掉有低偏差的点集 $\mathcal{P}_{n+1}(a)$ 的最后一点以得到低偏差集合 $\mathcal{P}_n(a)$. 这一想法给出了设计输出矢量初始集的另一途径. 例如，当 $n=6$ 时，用这个方法得到的输出矢量位于图 4.3 (a) 之中，其中 MSE = 0.2522955, 而 MSE 值位于图 4.1 的 "0" 处，它比图 4.3 (b) 的 MSE = 0.2711950 好些. 类似地，对于 $n=32$ 我们也可以得到一个输出矢量集合，其中 MSE = 0.056895, 它比表 4.3 中的 MSE = 0.0569415 好些.

我们在这里已经见到输出矢量的初始集的选取的重要性. NTM 给出了生成输出矢量的初始集的一般程序，看来似乎比文献上已有的其他方法好些，但仅仅只用一个 NTM, 结果并不总是很好. 所以，我们建议用几种方法，例如，附注 4.5 与 4.6 中所介绍的方法，然后从比较它们的结果中得到较好的结果.

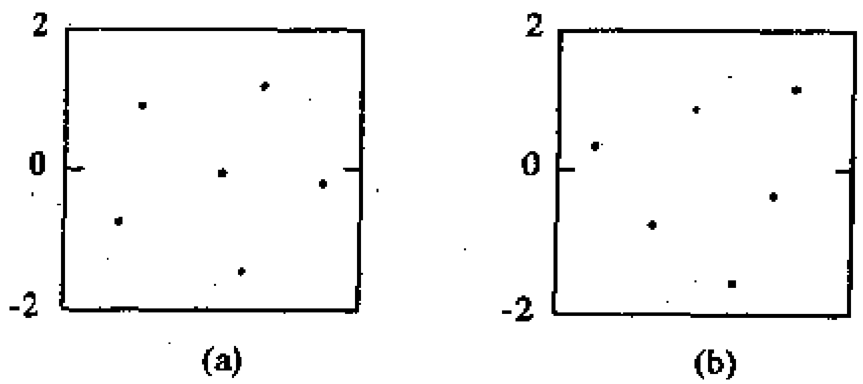


图 4.3 $N_2(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$ 的两个 mse 代表点集

例 4.5　B_s 上的均匀分布

在 §1.5, 我们已经介绍了获得低的伪 F- 偏差的 $U(B_s)$ 的代表点的方法. 现在我们用 MSE 准则来给出 $U(B_s)$ 的 mse 代表点.

均匀分布 $U(B_s)$ 是球对称并有随机分解 (4.2.1), 其中 R 的 c.d.f. 为

$$F_s(r) = r^s$$

及 (4.2.2) 中的 $r_k = c_{ks}^{1/s}$.

当 $n = 8, 16$ 与 32 时, 图 4.4 画出了用 NTLBG 算法给出的 $U(B_s)$ 的 mse 代表点及其对应 MSE 之值 0.032936, 0.016591 与 0.008116. 与图 1.11 相比较, 我们看出由这两个准则得到的 mse 代表点是不同的. 由 MSE 准则得到的 mse 代表点在圆中的位置比较对称. 例如当 $n = 8$ 时, 一个点位于圆心, 其他 7 个点均匀地位于一个同心圆上. 当 $n = 16$ 时, 4 个点均匀地散布在一个同心圆上, 其他 12 个点则均匀散布在另一个同心圆上. 若由 F-偏差准则来获得代表点, 并将这些点表成极坐标 (r_i, θ_i), 则很可能没有两个点有相同的 r_i 或 θ_i.

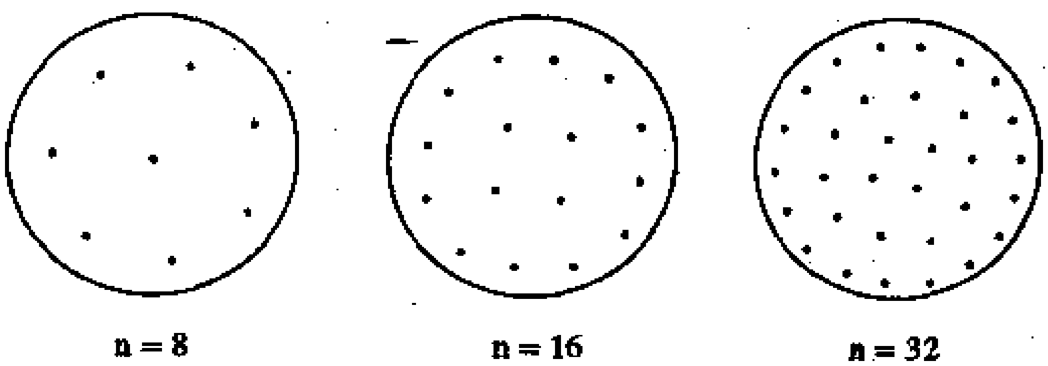


图 4.4　$U(B_2)$ 的 mse 代表点

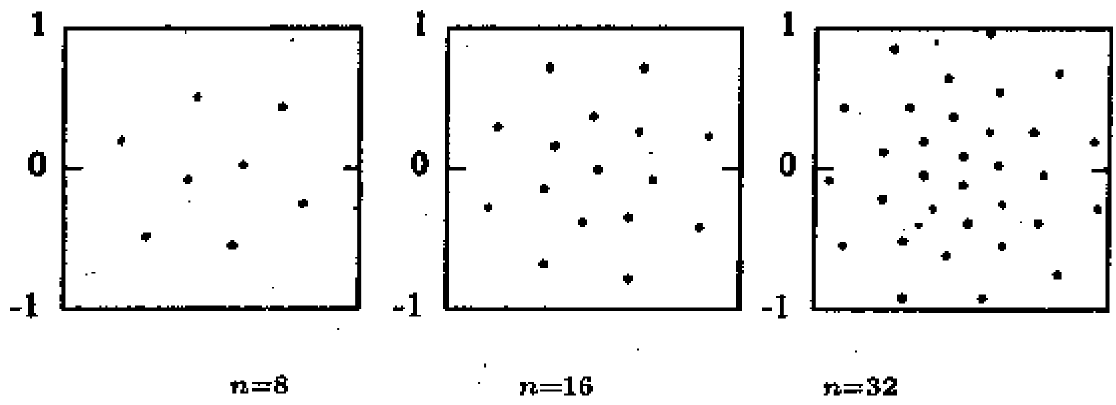


图 4.5 mse 代表点

例 4.6 多元对称 Pearson VII 型分布

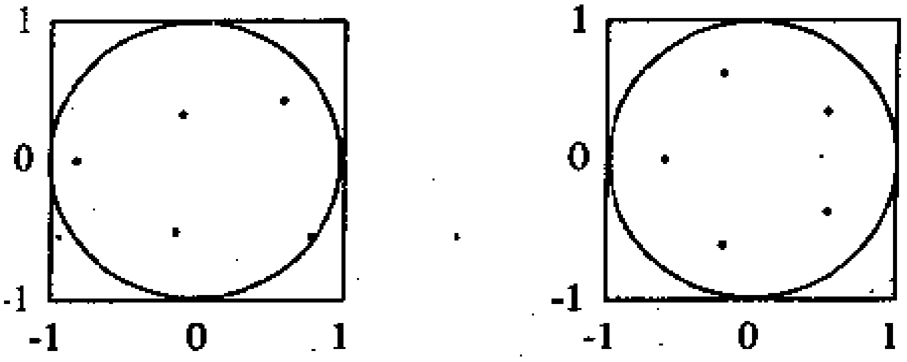
这些分布已在例 2.4 中定义过. 多元对称 Pearson VII 型分布的 p.d.f. 为

$$\frac{\Gamma(N)}{(\pi m)^{-s/2}\Gamma(N-\frac{s}{2})}\left(1+\frac{1}{m}\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}\right)^{-N}, \quad N>\frac{s}{2}, m>0. \quad (4.6.1)$$

对于 (4.5.1), 我们已经建议了有效的方法 (4.2.8) 来计算 (4.2.2) 中的 r_k. 所以多元对称 Pearson VII 型分布的 mse 代表点可以用 NTLBG 算法来求得. 例如当 $m=4$, $N=15$ 及 $s=2$ 时, 对于 $n=8$, 16 与 32, 我们用 NTLBG 算法生成输出矢量集, 它们的 MSE 分别为 0.032294, 0.017586 与 0.009286. 这些结果画在图 4.5 之中.

§ 4.7 代表点的几个附注及其在积分中的应用

我们已经介绍了两种生成代表点的方法. 其一基于 F- 偏差或伪 F- 偏差, 另一则基于 MSE 准则. 由于每一种代表点都有其特殊的用途, 所以一般很难说那个方法更好. 按照我们的经验, 我们向读者指出以下诸点. 为简单计, 我们用代表点 (I) 表示用第一种方法得到的代表点. 类似地可以定义代表点 (II).



(a) 代表点 (I)　　　　(b) 代表点 (II)

图 4.6　两种代表点

代表点 (I) 容易生成，而代表点 (II) 则不易生成. 因此后者适宜于仅需小数目代表点之情况. 例如，试验设计 (第 5 章), 工业标准化与信息论. 对于多重积分近似计算，最优化与统计模拟，我们推荐代表点 (I).

因为选择代表点 (I) 的原则为使经验分布与总体分布之差小，所以如果把代表点当成一个样本，则代表点 (I) 的随机性质比代表点 (II) 的随机性为优. 因此由代表点 (I) 得到的样本矩与总体矩之差很小 (图 1.9 及表 1.1 与表 1.2).

这两种代表点均可以用于试验设计 (第 5 章). 我们总希望代表点在试验区域中散布均匀. 例如将 5 个零件放在一个盘子上放入炉中加热. 我们当然希望 5 个零件放在盘中的一个好位置. 这个问题等价于在盘子里找一个均匀散布的点集. 一般说来，由于代表点 (I) 看上去似乎散布得不均匀，所以它不易被工程师接受，而他们宁愿用代表点 (II) (图 4.6).

在第 2 章，我们用均匀分布的代表点 (I) 于多重积分近似计算. 当然其他分布的代表点 (I) 也可以用于数值积分. 命 $\boldsymbol{x}$ 为一个 s- 维随机矢量，它有 p.d.f. $p(\boldsymbol{x})$. 命 $f(\boldsymbol{x})$ 为一个可积函数，则积分

$$I \equiv E(f(\boldsymbol{x})) = \int f(\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x} \tag{4.7.1}$$

可以用

$$I \cong \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(\boldsymbol{x}_i), \tag{4.7.2}$$

来近似，此处 $\{\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n\}$ 为 $p(\boldsymbol{x})$ 的一个代表点集. 例如积分

$$I = \int_D p(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \cong \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I(\boldsymbol{x}_i \in D), \tag{4.7.3}$$

为概率 $P(\boldsymbol{x} \in D)$, $D \in R^s$, 的近似值，此处 $I(\cdot)$ 为 D 的指标函数. 这个方法类似于蒙特卡罗方法中的 **成败方法** (Rubinstein (1981) 115 页), 所以称之为 **NT 成败方法** 或 **NT hit-miss 方法** 或 (NTHM). 第二章给出的 **NT-均值方法** 则相当于蒙特卡罗方法中的样本均值方法. 在蒙特卡罗理论中，后一方法比前一方法优越，所以我们相信对 NTM, 这一结论仍成立；即 (4.7.2) 不及 NT- 均值方法. 但 (4.7.2) 在某些情况仍很有用. 例如，假定 $\{D_i, i = 1, \cdots, m\}$ 为 R^s 的一个剖分. 则概率

$$p_i = P(\boldsymbol{x} \in D_i), \qquad i = 1, \cdots, m.$$

可以由 (4.7.3), 即

$$p_i \cong \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} I(\boldsymbol{x}_j \in D_i), \qquad i = 1, \cdots, m, \tag{4.7.4}$$

来近似. 在此我们仅生成代表点集 $\{\boldsymbol{x}_k\}$, 然后再计算 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 落入 D_i 的个数，我们将点数记为 n_i, $1 \le i \le m$. 则由 (4.7.4) 得

$$p_i \cong n_i/n, \qquad i = 1, \cdots, m.$$

这表示这 m 个概率的近似值被同时得到.

例 4.7 定限概率

我们已在例 2.6 介绍了计算概率的方法．现在我们来计算所有八个卦限的概率．置

$$D_1 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 > 0,\ x_2 > 0,\ x_3 > 0\},$$
$$D_2 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 > 0,\ x_2 > 0,\ x_3 < 0\},$$
$$D_3 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 > 0,\ x_2 < 0,\ x_3 > 0\},$$
$$D_4 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 > 0,\ x_2 < 0,\ x_3 < 0\},$$
$$D_5 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 < 0,\ x_2 > 0,\ x_3 > 0\},$$
$$D_6 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 < 0,\ x_2 > 0,\ x_3 < 0\},$$
$$D_7 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 < 0,\ x_2 < 0,\ x_3 > 0\},$$
$$D_8 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 < 0,\ x_2 < 0,\ x_3 < 0\}$$

及

$$p_i = P(\boldsymbol{x} \in D_i), \qquad 1 \le i \le 8,$$

此处 $\boldsymbol{x} \sim Mt_3(5, \mathbf{0}, \boldsymbol{R})$, 其中

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}$$

与例 2.7 一样．我们已知 $p_1 = 0.25$. 其他的 p_i 可以用 (2.3.2) 及一个将 D_i 至 D_1 的变换求得．例如

$$p_2 = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^0 p(\boldsymbol{y}, \mathbf{0}, \boldsymbol{R})\, d\boldsymbol{y}.$$

置 $z_1 = y_1$, $z_2 = y_2$ and $z_3 = -y_3$. 则

$$p_2 = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty p(\boldsymbol{x}; \mathbf{0}, \boldsymbol{R}_2)\, d\boldsymbol{x},$$

其中

$$\boldsymbol{R}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 & -0.5 \\ 0.5 & 1 & -0.5 \\ -0.5 & -0.5 & 1 \end{pmatrix}.$$

因 $\det(\boldsymbol{R}_2) = \det(\boldsymbol{R})$, 所以由 (2.3.1) 得 $p_2 = 1/12$. 类似地，我们得 $p_i = 1/12, i = 3,4,5,6,7$ 及 $p_8 = 0.25$.

命 p_{ni} $(1 \le i \le 8)$ 为由 (4.7.4) 得出的 p_i 的近似值. 又命

$$T_n = \sum_{i=1}^{8} |p_{ni} - p_i|$$

为这八个概率 p_{ni} 的绝对误差之和，其中 n 表示用来计算诸 p_{ni} 的代表点数. 则 T_n 之值由表 4.4 给出，此处第 3 列由被积函数对称化得到 (§2.1), 所以样本大小为 $8n$. 我们见到 NTHM 的精度不及例 2.7, 而且被积函数对称化在此并无显著好处.

表 4.4 两种方法的误差

n	NTMH	被积函数对称化 ($8n$)
135	0.04444	0.007407
597	0.01256	0.010050
1010	0.00693	0.003630
2440	0.001639	0.001776
5037	0.003077	0.003971
10,007	0.0013324	0.000333
39,029	0.000675	0.000521

因为在 NTHM 中，我们不需要将无穷区域化为有限区域，所以省去了例 2.7 中关于值 A 的确定. 这确实是一大优点. 如果概率的近似计算并不要求很高的精密度，那么这个方法就足够了. 除此而外，这个方法还可以用于球或单纯形上的分布. 我们用下面例子来说明这一点.

例 4.8 可加若吉斯蒂克正态分布

此时随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 由 (2.6.12) 来定义，我们将它记为 $\boldsymbol{x} \sim ALN_s(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma})$. 命

$$D_i = \{\boldsymbol{x} \in T_s : x_j > x_i, \quad j \neq i\}.$$

当 $s = 3$ 时， D_1, D_2, D_3 由图 4.7 给出. 现在我们来求概率 $p_i = P\{\boldsymbol{x} \in D_i\}, i = 1,2,3$. 表 4.5 与表 4.6 分别给出当 $\boldsymbol{x} \sim$

$ALN_3\left(\begin{pmatrix}\mu\\\mu\end{pmatrix}, \boldsymbol{I}_2\right)$ 及 $\boldsymbol{x} \sim ALN_3\left(\begin{pmatrix}\mu\\\mu\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0.5\\0.5 & 1\end{pmatrix}\right)$ 时 $\{p_i\}$ 之值，其中 $\mu = 0,1,2,3,4$. 由于 ALN 分布的分量不对称，所以即使当 $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{0}$ 及 $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{I}_2$ 时，p_1, p_2 与 p_3 也不相同，这是很有兴趣的事.

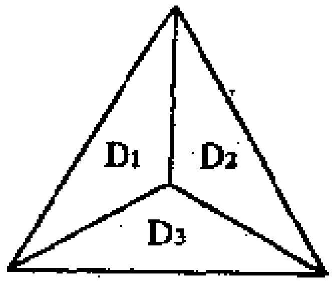


图 4.7

表 4.5 $ALN_3\left(\begin{pmatrix}\mu\\\mu\end{pmatrix}, \boldsymbol{I}_2\right)$ 的概率

μ	D_1	D_2	D_3
0	0.3750228	0.3750228	0.2500457
1	0.1461721	0.1461721	0.7076558
2	0.0226567	0.0222912	0.9550521
3	0.0013704	0.0014617	0.9971679
4	0.0000000	0.0000000	1.0000000

表 4.6 $ALN_3\left(\begin{pmatrix}\mu\\\mu\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 0.5\\0.5 & 1\end{pmatrix}\right)$ 的概率

μ	D_1	D_2	D_3
0	0.3703636	0.3058652	0.3237712
1	0.1659967	0.0894391	0.7445642
2	0.0358122	0.0086790	0.9555089
3	0.0034716	0.0002741	0.9962543
4	0.0001827	0.0000000	0.9998173

实际上 (4.7.1) 与 (4.7.2) 的想法可以用来近似计算任何连续函数的积分. 考虑 s- 维积分

$$I = \int f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}.$$

命 $p(\boldsymbol{x})$ 为 R^s 上的一个 p.d.f. 且对任意 $\boldsymbol{x}\in R^s$ 皆有 $p(\boldsymbol{x})>0$. 将 I 改写为

$$I=\int \frac{f(\boldsymbol{x})}{p(\boldsymbol{x})}p(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}. \tag{4.7.5}$$

将 (4.7.1) 与 (4.7.2) 用于 (4.7.5) 可得

$$I\cong \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{m}\frac{f(\boldsymbol{x}_i)}{p(\boldsymbol{x}_i)}, \tag{4.7.6}$$

此处 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ 为 $p(\boldsymbol{x})$ 的一个代表点集. 由蒙特卡罗方法的理论可知当 $p(\boldsymbol{x})$ 与 $f(\boldsymbol{x})$ 相似，即

$$f(\boldsymbol{x})/p(\boldsymbol{x})\approx 1 \tag{4.7.7}$$

时， (4.7.6) 的效率最高 (Rubinstein (1981), §4.3.1).

渐近公式 (4.7.6) 可以用于椭球对称分布类 $EC_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$. 这是由于这个类的每个元素的密度等高面都是椭球, 所以 (4.7.7) 易于满足. 进而言之，命 $f(\boldsymbol{x})=g((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}))$ 为 $EC_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$ 的 p.d.f. 及 $p(\boldsymbol{x})$ 为多元正态分布 $N_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的 p.d.f. 我们欲求概率

$$I=\int_D f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}. \tag{4.7.8}$$

记

$$I=\int_D \frac{f(\boldsymbol{x})}{p(\boldsymbol{x})}p(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}. \tag{4.7.9}$$

尽管 $f(\boldsymbol{x})$ 与 $p(\boldsymbol{x})$ 的轨迹都是椭球，但条件 (4.7.7) 仍可能不满足. 事实上，命 $\boldsymbol{y}\sim EC_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$ 与 $\boldsymbol{z}\sim N_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$, 并有随机分解

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\mu}+R_1\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{u}$$

与

$$\boldsymbol{z}=\boldsymbol{\mu}+R_2\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{u},$$

此处 $R_1>0, R_2>0$, R_1, R_2 与 $\boldsymbol{u}$ 独立，及 $\boldsymbol{u}\sim U(U_s)$. 因 R_1 与 R_2 有不同的分布，所以一般说来，(4.7.7) 不满足. 假定 R_1 的二阶矩有限. 命

$$c=\sqrt{\mathrm{Var}(R_2)/\mathrm{Var}(R_1)}. \tag{4.7.10}$$

因 $E(\boldsymbol{y})=E(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\mu}$, 所以 $c(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu})$ 与 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})$ 的密度相似，从而 (4.7.8) 的概率可以用

$$I_n\cong\frac{1}{nc}\sum_{i=1}^{n}\frac{g(\frac{1}{c}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu}))}{p(\boldsymbol{x})}I_D(\boldsymbol{x}_i) \tag{4.7.11}$$

来近似，此处 $\{\boldsymbol{x}_i, i=1,\cdots,n\}$ 是 $N_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的一个代表点集，而 I_D 为 D 的指标函数.

用 (4.7.11) 来估计椭球对称分布的概率的好处在于在程序中只要有正态分布的代表点即可. 如果我们用 NTM 或 Box-Muller 变换来生成正态分布的一个代表点集 (§4.3), 则一般说来，点数 n 相当大时，计算时间也不会太长. 因为避免了使用 $EC_s(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},g)$ 的代表点，所以计算程序变得既简单又有通用性. 不少例子表明这个方法无论从计算时间与精度来说，效果都很好.

§ 4.8 代表点在模拟中的应用

因为统计中许多问题没有解析解，所以统计模拟是一个重要工具. 命 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ 为具有 c.d.f. $F(\boldsymbol{x})$ 的总体中的一个样本，T 为 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ 的一个统计量. 如果 T 的分布没有解析表达式，则统计模拟建议用计算机生成一个样本 $\boldsymbol{x}_1,\cdots\boldsymbol{x}_N$, 然后找出 T 的一个样本 T_1. 独立地进行这个过程 m 次，我们得到 T 的样本 $T_1,\cdots,T_m$. 当 m 较大时，$T_1,\cdots,T_m$ 的经验分布接近 T 的分布. 所以我们可以得到 T 的临界点的近似及与之有关的，基于 $T_1,\cdots,T_m$ 的统计量. 长时间来，统计模拟有着广泛的应用，但它也有一些缺点：1) 经验分布收敛至基础分布的速度很慢；2)

如果我们要用一个有界闭域 D 上均匀分布的随机取样 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ 来代表 D, 则 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ 的均匀度很低. 本节，我们仅研究第二个问题并用一个实际问题来说明如何使用 NTM.

命 D 为模拟将要进行的区域. 我们需要在 D 上找出一个点集来代表 D. 当 D 是一个矩形时，我们在作模拟时，常常用一个均匀格子点集来代表 D. 当 D 不是矩形时，我们建议用一个 D 上的 NT-net. 本节我们将考虑一个实际问题并说明 NTM 在模拟中是有用的. 这个问题是一个确定圆与几个随机圆的相交部分的面积的分布问题.

给予 R^2 中圆心为 $\mathbf{0}$ 的单位圆 K. 假定有 m 个随机圆 $K_1,\cdots,K_m$ 它们的圆心与半径分别为 $\boldsymbol{O}_1,\cdots,\boldsymbol{O}_m$ 与 $r_1,\cdots,r_m$, 此处诸 r_i 为常数. m 个矢量 $\boldsymbol{O}_1,\cdots,\boldsymbol{O}_m$ 相互独立，而且每个 $\boldsymbol{O}_i$ 皆满足 $\boldsymbol{O}_i\sim N_2(\mathbf{0},\sigma_i^2\boldsymbol{I}_2)$, 其中 $\sigma_i>0$ 及 $\boldsymbol{I}_2$ 为 2×2 单位方阵. 命 S 为 K 及这 m 个随机圆的并之间的公共部分的面积，即

$$K\cap(K_1\cup\cdots\cup K_m) \tag{4.8.1}$$

的面积. 图 4.8 给出 $m=3$ 时的一个说明，其中 S 表示阴影部分的面积. 我们要求 S 的分布.

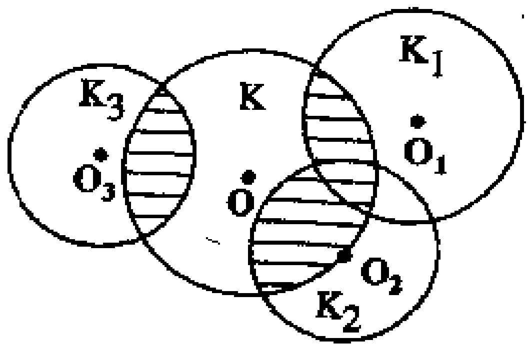


图 4.8 公共部分图

当 $m=1$ 时，两个圆相叠部分的面积可以明确地用这两个圆的半径及它们中心的距离表示出来，所以我们容易求出 S 的分布.

当 $m=2$ 时，图 4.9 给出 K_1 与 K_2 的位置的几种可能性，所以很难找出 S 的分布的简单表达式. 这就需要一个寻求 S 的分布的有效方法. 这是一个几何概率问题

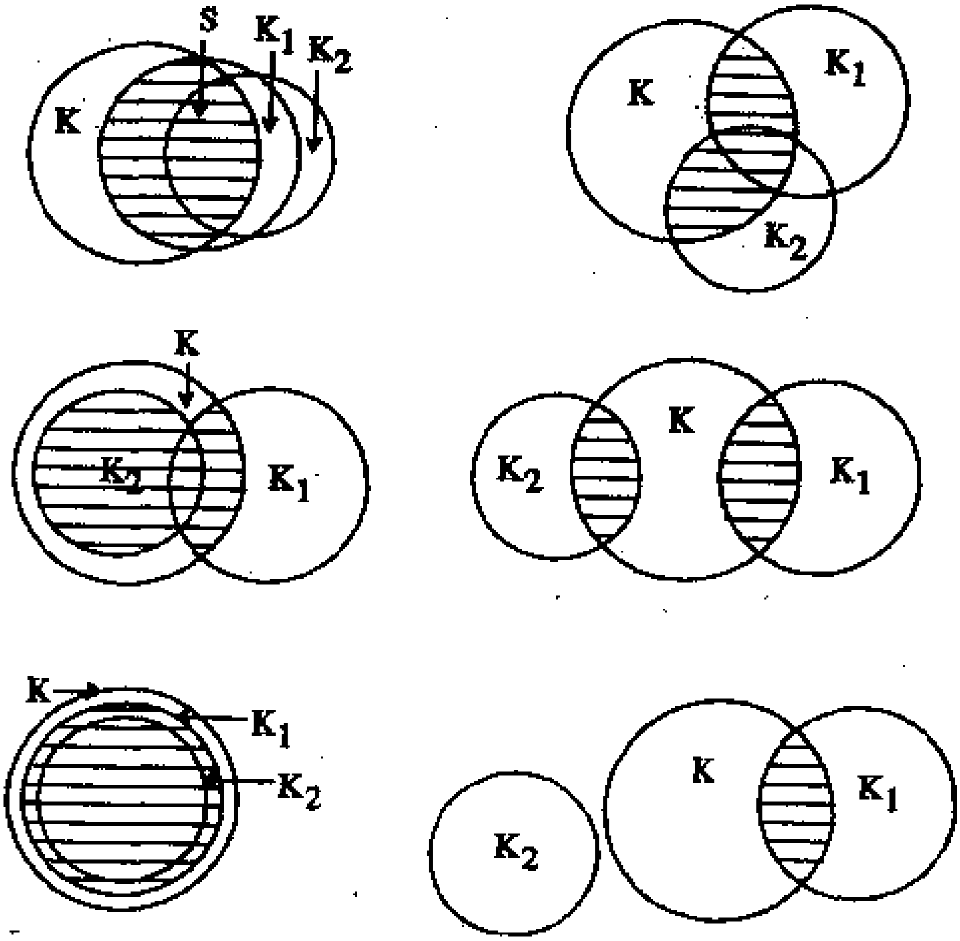


图 4.9

模拟是处理这个问题的自然途径. 经典的方法称为**格点方法**. 命 ABCD 为单位圆 K 的外接正方形如图 4.10 所示. 将 ABCD 分成边长为 $2/n$ 的 n^2 个小正方形，则在 $ABCD$ 中有下列 n^2 个格点，

$$\left(-1+\frac{2i}{n-1},\ -1+\frac{2j}{n-1}\right), \qquad 0\le i,j\le n-1$$

假定共有 N 点落在 K 中. 我们用蒙特卡罗方法生成 m 个随机圆，其中心为 $\boldsymbol{O}_i\sim N_2(\mathbf{0},\sigma_i^2\boldsymbol{I}_2)$，其半径为 $r_i\ (i=1,\cdots,m)$. 假定

这 N 个格点中有 M 点被这 m 个随机圆覆盖住，则我们对于 S 的分布，得到一个观测值 $\pi M/N$. 继续这个程序. 我们生成另外 m 个随机圆，从而得到 S 的分布的另一个观测值，如此等等. 我们得到 S 的一个经验分布. 为简单计，我们称这个模拟 S 的分布的过程为方法 I. 我们发现这一方法的收敛速度很低. 更严重的问题是即使当 N 很大时，这一方法的精密度仍很低，例如 $N=10,000$. 因为在 N 个点中，有 $O(\sqrt{n})$ 个点位于 K 的边界附近，所以方法 I 是不可接受的.

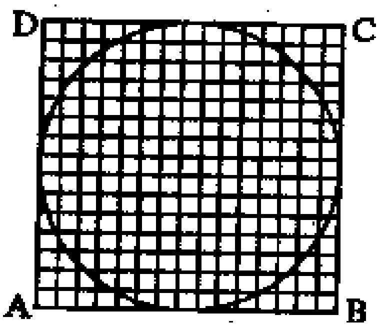


图 4.10 格点方法

另一个方法为将 n^2 个格点换成一个 $ABCD$ 上的 NT-net, 例如一个 glp 集合，用它来代替前面用作模拟的 n^2 个格点，这个方法称为方法 II. 令人惊奇的是方法 II 比方法 I 好得多. 方法 II 得到的结果由下面的比较中得知它比方法 I 得到的结果要精密得多. 因 $m=1$ 时，我们得知 S 的准确分布，这两种方法就在这种情况进行比较. 例如，在 PC/XT 上用了 180 分钟及一个大小为 1000 的样本，方法 I 得到的结果的误差为 0.15, 但同样的计算机用一个大小为 1500 的样本，由方法 II 只用了 4 分钟即得到误差只有 0.02 的结果. 方法 I 需要长的计算时间的理由是它需在方形 $ABCD$ 中撒下比方法 II 多得多的点，才能使误差不太大.

这两个方法都是基于 $ABCD$ 上，而不是 K 上的一个均匀散布点集，当然我们也可以用 K 上的一个 NT-net 来做模拟 (§1.4). 这将得到比方法 II 更好一点的结果. Jarrett 和 Morgan (1984)

用不同的方法，研究了与本节类似的问题，即补片 (patch-gap) 模型.

§ 4.9 代表点在几何概率中的应用

上节所讨论的问题可以看作 NTM 在几何概率中的一个应用. 几何概率的基本知识可以在 Kendall 和 Moran (1963) 的书中找到. 本节我们将讨论几何概率中的另一个问题：钢机球形轧辊的寿命分布. 这个问题来自轧钢生产线而且长时间找不到满意的解答 (成平 (1983)). 人们希望用随机球形轧辊轧钢机来代替通常的轧辊来延长轧辊的寿命. 这个问题的数学模型可以叙述于下：命 S 为 R^3 的单位球面，不断用一定宽度的独立随机带来加以覆盖. 每一个带都关于 S 的某一个大圆对称而且在 S 上均匀分布. 命 $G_h(\boldsymbol{x})$ 表示 S 上宽度 $2h$, 且有法方向 $\boldsymbol{x}$ 的随机带. 易见

$$G_h(\boldsymbol{x}) = \{\boldsymbol{a} : |\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}| \le h\}, \tag{4.9.1}$$

此处 $\boldsymbol{x} \sim U(S)$. 实际上，我们常常取 $0 < h < 0.3$. 命 $G_h(\boldsymbol{x}_1)$, $G_h(\boldsymbol{x}_2), \cdots$ 为总体 (4.9.1) 的一个序贯样本. 对于任何 $\boldsymbol{x} \in S$, 我们用 $K_N(\boldsymbol{x})$ 表前 N 个随机带中覆盖 $\boldsymbol{x}$ 的带子个数. 如果在轧辊，即 S, 上有一点被 m 个带子覆盖，则轧辊就报废了，此处 m 是一个给予的正整数. 给予 m 与 h, 命 $T_m(h)$ 表示轧辊的寿命，即适合下条件的最小的 N: 存在某 $\boldsymbol{x} \in S$ 使 $K_N(\boldsymbol{x}) \ge m$. 显然，我们有

$$\begin{aligned} T_m(h) &= \min\{N : K_N(\boldsymbol{x}) \ge m, \quad \text{对于某 } \boldsymbol{x} \in S\} \\ &= \min\Big\{N : \sup_{\boldsymbol{x}\in S} \sum_{j=1}^{N} I_{G_h(\boldsymbol{x}_j)}(\boldsymbol{x}) \ge m\Big\}, \end{aligned} \tag{4.9.2}$$

其中 $I_A(\cdot)$ 表示集合 A 的指标函数. 我们要求得到 $T_m(h)$ 与 $E(T_m(h))$ 的分布并找出一些延长轧辊寿命的途径.

易知 $I_{G_h(\boldsymbol{x}_j)}(\boldsymbol{x}) = I_{G_h(\boldsymbol{x})}(\boldsymbol{x}_j)$ 及

$$E(I_{G_h(\boldsymbol{x})}(\boldsymbol{x}_j)) = h \quad 和 \quad \mathrm{Var}(I_{G_h(\boldsymbol{x})}(\boldsymbol{x}_j) = h(1-h).$$

成平等 (1991) 证明了 $T_m(h)$ 的极限分布的一些性质:

(a) $\lim_{m\to\infty}(\frac{1}{m}T_m(h) - \frac{1}{h}) = 0$, a.s.

(b) $\lim_{m\to\infty}\frac{h}{\sqrt{1-h}}\, m^{1/2}(\frac{1}{m}T_m(h) - \frac{1}{h}) = \inf_{\boldsymbol{a}\in S} w(\boldsymbol{a})$, 此处 $\{w(\boldsymbol{a}), \boldsymbol{a}\in S\}$ 为有均值 0 及协方差

$$E(w(\boldsymbol{a})w(\boldsymbol{b})) = \{EI_{G_h(\boldsymbol{a})}(\boldsymbol{x})I_{G_h(\boldsymbol{b})}(\boldsymbol{x}) - h^2\}/h(1-h)$$

的高斯过程，其中 $\boldsymbol{x} \sim U(S)$.

(c) $\lim_{m\to\infty}\sup\frac{h}{\sqrt{1-h}}\{m(2\log\log m)^{-1}\}^{1/2}|\frac{1}{m}T_m(h) - \frac{1}{h}| = 1$, a.s.

上面理论结果是有兴趣的，但当 m 不是很大时，难于使用. 例如，若 $h = 0.1$ 及 $m = 20$, 方开泰与魏刚 (1989) 用模拟获得了样本平均与标准方差分别为 99.7 与 9.8. 但由 (a), (c) 得出极限分布的均值为 $\frac{h}{m} = 200$ 及渐近标准方差为 $\sqrt{m(1-h)}/h \approx 42.4$, 所以渐近结果与模拟结果之间有很大的差别，因此有必要用模拟来确定 $T_m(h)$ 的分布，均值与标准方差. 方开泰与魏刚 (1989) 建议了下面的模拟程序:

第 1 步　给出 m 与 h.

第 2 步　生成一个 n 个点的 NT-net $\{\boldsymbol{x}_k\}$, 例如 $n = 1067$. 置 $N = 1$.

第 3 步　由总体 $U(S)$ 中，用蒙特卡罗方法生成一点 $\boldsymbol{a}_N$, 于是得到一个带子 $G_h(\boldsymbol{a}_N)$.

第 4 步　计算在前 N 个带子中，覆盖住 $\boldsymbol{x}_k$ 的带子数，并将它记为 $K_N(\boldsymbol{x}_k)$. 若对于某个 k 有 $K_N(\boldsymbol{x}_k) = m$, 则进入第 5 步，否则用 $N+1$ 来代替 N 并回到第 3 步.

第 5 步　N 就是 $T_m(h)$ 的一个观测值.

将上述步骤重复 n_0 次，我们得到 $T_m(h)$ 的大小为 n_0 的一个样本. 例如，当 $m = 20$, $h = 0.1$ 及 $n_0 = 5000$ 时，方开泰与魏刚

的模拟表明样本均值与样本标准方差为

$$\bar{T}_m(h) = 99.7 \quad 与 \quad \sigma(T_m(h)) = 9.8,$$

类似地，他们得到大小为 5000 的 20 个样本 (总共 100,000 个观测值). 他们发现结果均十分接近. 他们亦发现 $T_m(h)$ 的分布接近于一个正态分布，但并不是正态的. 若 m 很大，则 $T_m(h)$ 的分布可以看作是正态分布.

进而言之，他们发现在 100,000 个观察值中最大的 $T_m(h)$ 是 125. 我们用 $G_h(\boldsymbol{a}_1^*),\cdots,G_h(\boldsymbol{a}_{125}^*)$ 表示对应的带子使球形轧辊的寿命最长. 这表明若 $\boldsymbol{a}_i = \boldsymbol{a}_i^*$, $i = 1,2,\cdots,125$ 固定，在情况 $h = 0.1$ 及 $n = 20$ 之下，我们总有 $T_m(h) = 125$. 这比随机选取 $\{\boldsymbol{a}_i\}$ 要好. 我们可以问： 这个结果还可能进一步改进吗？我们发现 $\boldsymbol{a}_1^*$, $\cdots$, $\boldsymbol{a}_{125}^*$ 在 S 上散布得并不是非常均匀的，所以猜想答案应该是正面的！

我们可以用 NTM 在 S 上生成一个比蒙特卡罗方法生成的更加均匀散布的点集. 我们用生成矢量 $(n;1,b)$ 生成的 C^2 上的 glp 集合 $\{\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, c_{k2}),\ k = 1,\cdots,n\}$, 然后得到 S 上的一个集合 $\{\boldsymbol{a}_k^{**} = (a_{k1}, a_{k2}, a_{k3})',\ k = 1,\cdots,n\}$ 此处

$$\begin{cases} a_{k1} = 1 - 2c_{k1}, \\ a_{k2} = 2\sqrt{c_{k1}(1-c_{k1})}\cos(2\pi c_{k2}), \\ a_{k3} = 2\sqrt{c_{k1}(1-c_{k1})}\sin(2\pi c_{k2}). \end{cases}$$

若取 $(n;1,b) = (155;1,20)$. 则得到 $T_m^*(h) = 155$. 这就是说轧辊的寿命可以是 155！

这个例子表明 NTM 比蒙特卡罗方法作的 100,000 个实验有了本质改进.

习题

4.1 命 $X \sim N(170, 9^2)$ 表示某城市男人身高 (cm) 的分布，利用 F- 偏差与 MSE 两种准则，给出 X 的 7 点代表点集. 如果我们考虑服装的尺寸，你宁愿用哪种代表点？

4.2 用 §4.3 的方法，写出一个用 TFWW 程序生成 U_s 上的 NT-net 的计算程序.

4.3 用习题 4.2, 写出生成下面分布代表点的计算程序.

(a) 多元正态分布 $N_s(\mathbf{0}, \boldsymbol{I}_s)$;

(b) 对称 Kotz 型分布；

(c) 多元对称 Pearson VII 型分布；

(d) 多元对称 Pearson II 型分布；

4.4 写出生成具有密度 (4.2.4), (4.2.5) 与 (4.2.9) 的多元 l_1- 范数对称分布的代表点.

4.5 命 $X \sim F(x)$ 具有有限二阶矩， $Q_n(x)$ 表示它的最优量子及 $(x_{n1}, \cdots, x_{nn})$ 为对应的代表点. 试证

(a) $L_n \to 0 (n \to \infty)$, 此处 $L_n = \text{MSE}\,(x_{n1}, \cdots, x_{nn})$;

(b) $\text{Var}(Q_n(X)) = (1 - L_n)\text{Var}(X)$;

(c) $\text{Var}(Q_n(X)) \le \text{Var}(Q_{n+1}(X))$;

(d) $\text{Var}(Q_n(X)) \to \text{Var}(X) \quad (n \to \infty)$.

4.6 命 $\{\boldsymbol{y}_i, i = 1, \cdots, n\}$ 为 R^s 的 n 个点及 $\{S_i, i = 1, \cdots, n\}$ 为 R^s 的一个剖分. 命 $p(\boldsymbol{x})$ 为 R^s 中的一个 p.d.f. 及当 $\boldsymbol{x} \in S_i$ 时有 $Q(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}_i$. 假定随机矢量 $\boldsymbol{x} \sim p(\boldsymbol{x})$. 试证

(a) $E\|\boldsymbol{x} - Q(\boldsymbol{x})\|^2 \ge E\|\boldsymbol{x} - Q^*(\boldsymbol{x})\|^2$, 此处当 $\boldsymbol{x} \in S_i^*$ 时， $Q^*(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}_i$ 及

$$S_i^* = \{\boldsymbol{x} : \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_i\| < \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_j\|, i \ne j\};$$

(b) $$E\|\boldsymbol{x} - Q(\boldsymbol{x})\|^2 \ge E\|\boldsymbol{x} - Q_*(\boldsymbol{x})\|^2,$$

此处 $Q_*(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}_i^*$, 其中 $\boldsymbol{x} \in S_i$ 及 $y_i^* = E(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in S_i)$.

4.7 命 $\boldsymbol{x}$ 服从一个对称 Kotz 型分布并且

$$\boldsymbol{\mu}=\mathbf{0} \text{ 及 } \boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix} 1 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}.$$

运用 (4.7.11) 求出所有八个卦限的概率 (例 4.7).

4.8 命 $\boldsymbol{x} \sim MT_3(5,\mathbf{0},\boldsymbol{R})$, 此处 $\boldsymbol{R}$ 由例 4.7 给出. 运用 (4.7.11) 算出所有八个卦限的概率并与例 4.7 的结果相比较.

4.9 用一个单位圆 K 上的 NT-net (§4.8) 及对于 $m=3, r_1=0.1, r_2=0.2, r_3=1.2$ 作模拟, 试求 K 与这三个随机圆的公共部分的面积 S 的分布.

第五章　试验设计和电算试验设计

本章我们将讨论数论方法在试验设计的应用．1980 年，我们曾利用 *glp* 集提出一种新型的试验设计方法，并称之为 **均匀设计**，用 UD 表示之．当因子的水平数较大时，和正交试验设计相比，均匀设计能显著地降低试验次数．均匀设计不仅可用于独立因子的试验设计，而且可用于非独立因子的试验设计，例如 **混料设计**．在近年来，**电算试验设计** 发展十分迅速，电算设计和 UD 有一定的联系，需要我们作进一步的研究．本章我们将扼要地介绍电算试验设计．

§ 5.1　引　言

试验设计是统计学的一个分支，它在农业，工业与自然科学中是十分重要的．让我们首先来看一个例子．

例 5.1　考虑可能影响化学产品的三个变数：温度 (A)，时间 (B)，及碱的浓度 (C)：它们取如下的值：

温度 (A)：80°C，85°C　90°C

时间 (B)：90m，120m，150m

浓度 (C)：5%，6%，7%

我们将三个变数的不同值分别记为 $A_1, A_2, A_3, \cdots, C_2, C_3$．这里温度，时间与浓度称为试验的 **因子**，而 80°C，85°C，90°C 则称为因子温度的 **水平**．

试验的目的在于研究每个因子在反应中的影响，并发现水平的最佳组合．一个好的试验设计为用最少的试验次数以获得最大的信息量．下面为设计试验的一些方法：

(1) 考虑所有水平的组合. 在例 5.1 中共有 $3\times3\times3=27$ 种组合. 这一方法只有当因子与水平个数均很小时可用. 例如, 假定共有 6 个因子, 每个因子有 5 个水平, 则组合的点数为 $5^6=15,625$, 太大了.

(2) 做单因子试验 (单项试验) 若干次. 该法只有当因子间无作用时有效.

(3) 正交设计. 所谓 **正交设计** 是最常用而且有长久历史的试验设计, 它用一系列 **正交表** 来安排试验. 例如我们可以用正交表 $L_9(3^4)$ (表 5.1) 来安排例 5.1 之试验.

表 5.1 $L_9(3^4)$

No	1	2	3	4
1	1	1	1	1
2	1	2	2	2
3	1	3	3	3
4	2	1	2	3
5	2	2	3	1
6	2	3	1	2
7	3	1	3	2
8	3	2	1	3
9	3	3	2	1

在记号 $L_9(3^4)$ 中, "L" 表示 **拉丁方**, "9" 表示试验数, "3" 表示水平数, "4" 表示使用这张表时, 最大的独立因子数. 我们可以任取 $L_9(3^4)$ 的 3 列作为因子 A,B,C 之用. 于是我们得到下面的试验设计表 5.2.

这个试验设计为从 27 种可能试验中选出 9 种代表试验, 它给每个因子及每个水平以同等地位: (a) 每个因子的每个水平重复 3 次. (b) 任何两个因子的所有水平的每一组合都出现同样次数. 我们分别称性质 (a), (b) 为 **均衡性** 与 **正规性**. 我们还可以看到由正交设计给出的试验点在试验区域中是均匀散布的. 下面的例子将说明正交设计有时也需要过多的试验.

表 5.2 试验设计

No	A	B	C
1	80°C	90m	5%
2	80°C	120m	6%
3	80°C	150m	7%
4	85°C	90m	6%
5	85°C	120m	7%
6	85°C	150m	5%
7	90°C	90m	7%
8	90°C	120m	5%
9	90°C	150m	6%

例 5.2 多种化学元素的混合的危害估计是一个复杂的问题. 环境中各种化学元素浓度改变后的后果难于预测. 欲安排一个试验，有六种元素： 镉 (cadmium (Cd)), 铜 (copper (Cu)), 锌 (zinc (Zn)), 镍 (nickel (Ni)), 铬 (chromium (Cr)), 与铅 (lead (Pb)), 其浓度 (ppm) 为： 0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.8, 1, 2, 4, 5, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20. 需要研究这六种金属对 Reuber H-35 鼠的死亡率的综合影响.

所有组合构成的试验总数为 $17^6 = 24,137,569$. 这对任何实验来说都太多了. 我们已知这六种金属间有相互作用，所以我们不能用上述第二个方法，即多次单因子试验. 如果我们用正交设计，则试验数目至少为 $17^2 = 289$, 仍嫌太多. 所以方开泰与王元 (方开泰 (1980), 王元与方开泰 (1981)) 建议一个新的试验设计，它称为均匀设计 (UD), 而且给出 UD 的很多表. 例如，表 5.3 表示一个 UD 表， $U_{17}(17^{16})$, 其中记号 $U_n(q^t)$ 具有正交表类似的含义： "U" 表示 UD, "n" 表示试验数， "q" 表示每个因子的水平个数，及 "t" 表示表中最大列数. 我们需要 $U_{17}(17^{16})$ 的 16 个列中的 6 列. 按表 5.12, 我们推荐 $U_{17}(17^{16})$ 的 1, 4, 6, 10, 14 与 15 列，它所对应的试验设计由表 5.4 给出

表 5.3 $U_{17}(17^{16})$

No	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
2	2	4	6	8	10	12	14	16	1	3	5	7	9	11	13	15
3	3	6	9	12	15	1	4	7	10	13	16	2	5	8	11	14
4	4	8	12	16	3	7	11	15	2	6	10	14	1	5	9	13
5	5	10	15	3	8	13	1	6	11	16	4	9	14	2	7	12
6	6	12	1	7	13	2	8	14	3	9	15	4	10	16	5	11
7	7	14	4	11	1	8	15	5	12	2	9	16	6	13	3	10
8	8	16	7	15	6	14	5	13	4	12	3	11	2	10	1	9
9	9	1	10	2	11	3	12	4	13	5	14	6	15	7	16	8
10	10	3	13	6	16	9	2	12	5	15	8	1	11	4	14	7
11	11	5	16	10	4	15	9	3	14	8	2	13	7	1	12	6
12	12	7	2	14	9	4	16	11	6	1	13	8	3	15	10	5
13	13	9	5	1	14	10	6	2	15	11	7	3	16	12	8	4
14	14	11	8	5	2	16	13	10	7	4	1	15	12	9	6	3
15	15	13	11	9	7	5	3	1	16	14	12	10	8	6	4	2
16	16	15	14	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17	17

表 5.4 例 5.2 的试验设计

No	Cd	Cu	Zn	Ni	Cr	Pb
1	0.01	0.2	0.8	5.0	14.0	16.0
2	0.05	2.0	10.0	0.1	8.0	12.0
3	0.1	10.0	0.01	12.0	2.0	8.0
4	0.2	18.0	1.0	0.8	0.4	4.0
5	0.4	0.1	12.0	18.0	0.05	1.0
6	0.8	1.0	0.05	4.0	18.0	0.4
7	1.0	0.8	2.0	0.05	12.0	0.1
8	2.0	16.0	14.0	10.0	5.0	0.01
9	4.0	0.05	0.1	0.4	1.0	18.0
10	5.0	0.8	0.4	16.0	0.2	14.0
11	8.0	5.0	16.0	2.0	0.01	10.0
12	10.0	14.0	0.2	0.01	16.0	5.0
13	12.0	0.01	5.0	8.0	10.0	2.0
14	14.0	0.4	18.0	0.2	4.0	0.8
15	16.0	4.0	0.4	14.0	0.8	0.2
16	18.0	12.0	8.0	1.0	0.1	0.05
17	20.0	20.0	20.0	20.0	20.0	20.0

本章我们将介绍 UD 的思路，如何找出 UD 表，并讨论试验区域中试验点的均匀性判别法则，我们还要介绍混料试验的均匀设计 (**UDEM**).

在中国近十年来 UD 已成功地用于中国的纺织工业、手表工业、冶金工业、软件设计与军事科学.

§ 5.2 均匀设计

假定有 s 个因子，每个因子有 q 个水平，则一切可能的水平组合试验有 q^s 个. 正交设计是从这 q^s 个组合中，选出代表性较好的 q^2 个试验. 不失一般性，设试验的范围是 C^s，正如 §5.1 所介绍的，这 q^2 个试验点应在 C^s 中整齐排列，散布均匀，因此，这 q^2 个点可以看成是均匀分布 $U(C^s)$ 的代表点. 但是，若用偏

差来测量这 q^2 个点的均匀度，其结果是很差的 (例 1.2). 另一方面，正交设计要求试验点到任何二维边缘子空间的投影为均匀格子点分布，因此，试验次数至少为 q^2 个，这就是正规性. 正规性要求是便于进行方差分析，便于估计因子的**主效应**和因子间的**交互效应**, 从而便于进行有关的假设检验. 当 $q>2$, 若我们希望估计所有交互效应时，试验的数目至少 q^s. 因此，我们不能通过正交试验的 q^2 个试验来获得所有交互效应的估计. 例如，当 $s=3, q=3$ 时，我们用 $L_9(3^4)$ (表 5.1) 的前三列来安排试验，用 $\alpha_A, \alpha_B, \alpha_C$ 分别表示 A, B, C 的**因子效应**, 用 α_{AB}, α_{AC} 和 α_{BC} 表示二阶交互效应，那么 $L_9(3^4)$ 的四列分别代表下列效应：

1	2	3	4
α_A	α_B	α_C	
α_{BC}	α_{AC}	α_{AB}	$\alpha_{AB}, \alpha_{AC}, \alpha_{BC}$

我们看到，每个列至少有两个以上效应的混合，因此，想估计任何效应都是不可能的. 如果三阶交互效应 α_{ABC} 需要考虑，其混合的程度将更为严重. 因此，当 $q>2, n=q^2$ 时，对正交试验使用方差分析已失去意义. 因为方差分析对多水平的正交试验失去作用，因此，当 q 大时 (例 5.2), 在安排试验时没有必要考虑方差分析的要求. 所以只考虑试验点在 C^s 中的均匀性是合理的.

所谓均匀设计，是使试验点在 C^s 中均匀散布的设计. 鉴于 NT-net 在 C^s 上的均匀性，均匀设计就是选择 C^s 上的一个 NT-net 或 $U(C^s)$ 的代表点. 在第四章我们曾经提出了两个均匀性准则： F 偏差和 MSE, 来寻求一个已知分布的代表点. 两个准则都可用于试验设计. 我们首先讨论根据 F 偏差准则来获得 UD.

类似于正交设计，我们也提供了不少 UD 的表 (例如表 5.3), 它是由 *glp* 集合生成的. 现在我们来介绍构造 UD 表的方法：

5.2.1 均匀设计表

用 $U_n(q^t)$ 表示一个 UD 表，它是由 *glp* 集的生成矢量为 (n;

$h_1, \cdots, h_t$) 生成的，其中 $1 = h_1 < h_2 < \cdots < h_t < n$, g.c.d., $(n, h_i) = 1$, $i = 1, \cdots, t$. 令

$$q_{ki} \equiv kh_i (\mathrm{mod}\, n), \qquad k = 1, \cdots, n, \quad i = 1, \cdots, t, \tag{5.2.1}$$

其中，同余运算修改为使得 $0 < q_{ki} \leq n$. 表 $U_n(n^t)$ 由 (q_{ki}) 组成.

尽管 glp 集合已在 §1.3 中讨论过，而且在前几章出现过，本章仍有必要详细讨论. 例如在 glp 集合用于数值积分时，条件 g.c.d. $(n, h_i) = 1$, $i = 1, \cdots, t$ 可以去掉，但在 UD 中这一条件是必需的.

当 n 给定，可能的 h_i 的最大数目是多少？数论 (华罗庚 (1956)) 已证明可能的 h_i 的数目由欧拉函数 $\varphi(n)$ 给出：

$$\varphi(n) = n \prod_{p|n} \left(1 - \frac{1}{p}\right),$$

此处 p 取 n 的一切素因子. 例如

$$\varphi(12) = 12\left(1 - \frac{1}{2}\right)\left(1 - \frac{1}{3}\right) = 4,$$

因为 $12 = 3 \times 2^2$, 从而满足 $(h_i, n) = 1$, 可能的 h_i 为 1, 5, 7 11; 又如

$$\varphi(9) = 9\left(1 - \frac{1}{3}\right) = 6,$$

其相应的 h_i 为 1, 2, 4, 5, 7, 8; 又如

$$\varphi(7) = 7\left(1 - \frac{1}{7}\right) = 6,$$

相应的 h_i 为 1, 2, 3, 4, 5, 6. 因此，给定 n, 有 $t = \varphi(n)$. 表 $U_7(7^6)$ 和 $U_9(9^6)$ 由表 5.5 和 5.6 给出.

因为在 $U_7(7^6)$ 中 $1 + 6 = 7$, $2 + 5 = 7$, $3 + 4 = 7$, 矩阵 (q_{ij}) 的秩至多为 4. 一般来讲，使用 $U_n(n^t)$ 时独立因子的数目不能超过 $\varphi(n)/2 + 1$ (丁元 (1986)).

表 5.5　$U_7\ (7^6)$

No	1	2	3	4	5	6
1	1	2	3	4	5	6
2	2	4	6	1	3	5
3	3	6	2	5	1	4
4	4	1	5	2	6	3
5	5	3	1	6	4	2
6	6	5	4	3	2	1
7	7	7	7	7	7	7

表 5.6　$U_9\ (9^6)$

No	1	2	3	4	5	6
1	1	2	4	5	7	8
2	2	4	8	1	5	7
3	3	6	3	6	3	6
4	4	8	7	2	1	5
5	5	1	2	7	8	4
6	6	3	6	3	6	3
7	7	5	1	8	4	2
8	8	7	5	4	2	1
9	9	9	9	9	9	9

设在实际问题中有 s 个独立因子，每个因子有 n 个水平．若 $\varphi(n)/2+1 \geq s$, 我们可以用 UD 表 $U_n(n^t)$ 来安排试验．众所周知，在正交表 $L_n(q^t)$ 中用任意 $s(<t)$ 列是等价的．但是，由 $U_n(n^t)$ 中任取 s 列，不同的取法其效果是不同的 (图 1.6 (c), (d))．因此我们需要研究如何定义一个设计的均匀性以及如何选出均匀性最好的 s 列．

5.2.2 设计矩阵的等价性

定义 5.1 称一个 $n \times s$ 矩阵

$$\boldsymbol{A}=(a_{ij})=(\boldsymbol{a}_{(1)},\cdots,\boldsymbol{a}_{(n)})'=(\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_s) \tag{5.2.2}$$

为**均匀设计矩阵** (或简称**设计矩阵**), 若 $\boldsymbol{A}$ 的每一列均为 $(1,\cdots,n)$

的一个置换，且 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=s$. 令

$$x_{ki}=(2a_{ki}-1)/2n,\quad i=1,\cdots,s;\qquad k=1,\cdots,n.$$

矩阵 $\boldsymbol{X}=(x_{ki})$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的**诱导阵**. 用 $\mathcal{A}_{n\times s}$ 或 $\mathcal{A}$ 表示一切 $n\times s$ 均匀设计阵的集合，易见对任 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{A}$ 有

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{k=1}^{n}a_{kj}=n(n+1)/2,\\&\sum_{k=1}^{n}a_{kj}^2=n(n+1)(2n+1)/6,\end{aligned}\right.\qquad j=1,\cdots,s.\tag{5.2.3}$$

定义 5.2 两个设计矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$ 称为相互等价的，若存在两个置换阵 $\boldsymbol{P}_1:n\times n$ 和 $\boldsymbol{P}_2:s\times s$ 使得

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{P}_2.\tag{5.2.4}$$

并表为 $\boldsymbol{A}_1\approx\boldsymbol{A}_2$.

一个矩阵 $\boldsymbol{P}$ 称为置换阵, 若每一行每一列只有一个元素为 1, 其余元素为 0 , 由 (5.2.1) 所定义的矩阵 $\boldsymbol{Q}=(q_{ki})$ 显然是一个均匀设计阵, 并记为 $\boldsymbol{Q}_n(h_1,\cdots,h_s)$. 当 $(h_1,\cdots,h_s)=(1,a,\cdots,a^{s-1})\pmod n$ 时, 则简记为 $\boldsymbol{Q}_n(a)$. 一个整数 b 称为 a 的同余逆若 $ab\equiv 1\pmod n$, 并记成 $b=a^{-1}\pmod n$. 利用同余逆有如下结果：

定理 5.1 设 $(l_1,\cdots,l_s)$ 是 $(1,\cdots,s)$ 的一个置换, $h_j^{(i)}=h_i^{-1}h_j\pmod n$, 且 $1,a,a^2,\cdots,a^{s-1}\pmod n$ 是互不相同的整数，则

(a) $\qquad\boldsymbol{Q}_n(h_1,\cdots,h_s)\approx\boldsymbol{Q}_n(h_{l_1},\cdots,h_{l_s})$;

(b) $\qquad\boldsymbol{Q}_n(h_1,\cdots,h_s)\approx\boldsymbol{Q}_n(h_1^{(i)},\cdots,h_s^{(i)}),\qquad 1\le i\le s$;

(c) $\qquad\boldsymbol{Q}_n(a)\approx\boldsymbol{Q}_n(a^{-1})\pmod n$.

证明 令 $\boldsymbol{P}_{m_i}=(p_{ij})$ 为一个 $s\times s$ 置换阵，其中 $p_{m_i i}=p_{i,m_i}=1, p_{qq}=1(q\ne i,m_i)$, 其余元素为 0. 对 $\boldsymbol{Q}_n(h_1,\cdots,h_s)$ 右

乘 $\boldsymbol{P}_{l_1},\cdots,\boldsymbol{P}_{l_s}$ 则得 (a). 往证 (b): 因为 $(h_i^{-1}h_1k,\cdots,h_i^{-1}h_sk)=(h_1(h_i^{-1}k),\cdots,h_s(h_i^{-1}k))$ $(k=1,\cdots,n)$, 则 $\boldsymbol{Q}_n(h_1^{(i)},\cdots,h_s^{(i)})$ 可通过 $\boldsymbol{Q}_n(h_1,\cdots,h_s)$ 的行交换而得到. 在 (b) 中取 $h_j=a^{j-1}(1\le j\le s)$ 及 $i=s$ 则得 (c).

5.2.3 设计的均匀性

一个设计矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所谓均匀性度量是一个非负函数 $U:\mathcal{A}$ (或 $\mathcal{X}$) $\to R_+=\{x:x\ge 0\}$. 为方便计，均匀性度量在本章称为 ***U* 准则**. 显然，一个 U 准则必须满足

$$U(\boldsymbol{A})=U(\boldsymbol{B}) \tag{5.2.5}$$

若 $\boldsymbol{A}\approx\boldsymbol{B}$.

本章我们将引进几个 U 准则，它们来自数论方法、几何方法和统计方法. 在本子节中我们只介绍数论方法，其它方法将在 §5.4 说明.

给定一个诱导阵 $\boldsymbol{X}$, 令 $F_n(\boldsymbol{x})$ 表示它的行向量的经验分布，$F(\boldsymbol{x})$ 表示 $U(C^s)$ 的 c.d.f. 所谓 $\boldsymbol{X}$ 的 $\boldsymbol{l_p}$ **偏差** 定义为

$$D_p(\boldsymbol{X})=\left[\int_{C^s}|F_n(\boldsymbol{x})-F(\boldsymbol{x})|^p d\boldsymbol{x}\right]^{1/p}. \tag{5.2.6}$$

当 $p=1,2,\infty$ 时，我们分别得到 l_1 偏差，l_2 偏差和 l_∞ 偏差，后者正是众所周知的偏差 (§1.4). 显然，所有的 D_p 均为 U 准则.

Warnock (Niederreiter (1973 b)) 给出计算 l_2 偏差的计算公式

$$\begin{aligned}D_2(\boldsymbol{X})=&3^{-s}-\frac{2^{1-s}}{n}\sum_{k=1}^{n}\prod_{l=1}^{s}(1-x_{kl}^2)\\&+\frac{1}{n^2}\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\prod_{i=1}^{s}(1-\max(x_{ki},x_{ji})).\end{aligned} \tag{5.2.7}$$

因为对 *glp* 集直接计算偏差 (即 D_∞) 其计算量是很大的，运用数论技巧可以将计算偏差的问题化为如下的问题 (王元，方

开泰 (1981)): 在一切可能的矢量 $\boldsymbol{h}$ 中求一个最好的矢量 $\boldsymbol{h}^*=(h_1^*,\cdots,h_s^*)$ 使得

$$D(\boldsymbol{h})=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\prod_{r=1}^{s}\left(1-\frac{1}{n}\ln\left(2\sin\left(\frac{\pi q_{kr}}{n+1}\right)\right)\right) \tag{5.2.8}$$

在 $\boldsymbol{h}=\boldsymbol{h}^*$ 达极小. 王元和方开泰 (1981) 给出了 $4\le n\le 31$ 和 $2\le s\le 16$ 时的 $\boldsymbol{h}^*$.

当 n 较大时, 寻找最好的 $\boldsymbol{h}^*$ 费时很长, 因此我们建议用形如

$$\boldsymbol{x}_k=(k,kb,\cdots,kb^{s-1})(\bmod n),\qquad 1\le k\le n, \tag{5.2.9}$$

的点集作为试验点, 这里 b 为一个整数, 介于 $1<b\le n$, 且 $b^i\neq b^j\ (\bmod\ n)$, $1\le i<j\le s-1$. 若 n 是素数, 则 b 常常取 n 的原根. 在附录 A.2 中大部分 $\boldsymbol{h}$ 有着 (5.2.9) 的形式, 即

$$\boldsymbol{h}=(1,b,\cdots,b^{s-1}). \tag{5.2.10}$$

偶数 n 的 UD 表, 可从 $n+1$ 的 UD 表中划去最后一行获得. 例如, 划去 $U_7(7^6)$ 的最后一行获得 $U_6(6^6)$.

在 §5.4 节我们将给出当 $n\le 31$ 时最好的 b 表 (表 5.12), 这对大部分实际问题是足够了.

注记 5.1 由 (5.2.8) 和 (2.1.5), 若 $\{h_r\}$ 选择适当, 似有

$$\begin{aligned}&\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\prod_{v=1}^{s}\left(1-\frac{2}{\pi}\ln\left(2\sin\left(\frac{\pi k h_v}{n+1}\right)\right)\right)\\ &\approx\int_0^1\cdots\int_0^1\prod_{i=1}^{s}\left(1-\frac{2}{\pi}\ln(2\sin(\pi x_i))\right)dx_i\\ &=\prod_{i=1}^{s}\int_0^1\left(1-\frac{2}{\pi}\ln(2\sin(\pi x_i))\right)dx_i.\end{aligned} \tag{5.2.11}$$

因为

$$\int_0^1\left(1-\frac{2}{\pi}\ln(2\sin(\pi x))\right)dx=1,$$

我们似应寻求 $\boldsymbol{h}$ 使 $|D(\boldsymbol{h})-1|$ 达到极小. 但是 (5.2.11) 右端的在 $[0,1]$ 上的积分有 0 和 1 两个奇异点，因此 (5.2.11) 并不成立，特别当 n 较小时.

注记 5.2 因 $D(\boldsymbol{h})$ 仅是 D_∞ 的主项，我们也可用

$$w(\boldsymbol{h})=\begin{cases}\dfrac{2}{n}\displaystyle\sum_{k=1}^{\frac{n-1}{2}}\prod_{v=1}^{s}\Big(1+2\pi^2B_2\Big(\Big(\frac{kh_v}{n}\Big)\Big)\Big), & \text{若 } 2\nmid n,\\ \dfrac{1}{n}\Big(1-\dfrac{\pi^2}{6}\Big)^{\mu}\Big(1+\dfrac{\pi^2}{3}\Big)^{s-\mu} & \\ \qquad+\dfrac{2}{n}\displaystyle\sum_{k=1}^{\frac{n}{2}-1}\prod_{v=1}^{s}\Big(1+2\pi^2B_2\Big(\Big(\frac{kh_v}{n}\Big)\Big)\Big)-1, & \text{若 } 2\mid n,\end{cases}$$

来代替 D_∞, 其中 μ 表示 $h_v(1\le v\le s)$ 为奇整数的数目，$B_2(x)=x^2-x+\frac{1}{6}$ 为 Bernoulli 多项式 (华罗庚与王元 (1981), 第四、八章).

§ 5.3 数据分析和例

本节通过两个例子来说明如何运用均匀设计来安排试验及其相应的数据分析. 大部分古典的试验设计方法通常都采用方差分析和回归分析来进行数据分析. 由于相对于试验的水平数而言，均匀设计的试验数目过少，以致无法进行通常的方差分析，故回归分析成为数据分析的主要手段.

设有 s 个因子，每个因子有 n 个水平，并用 $U_n(n^s)$ 表来安排试验，获得相应的因变量为 $\{y_k\}$, 于是我们有了一组观察值 $\{x_{k1},\cdots,x_{ks},y_k,k=1,\cdots,n\}$, 其中 $\{x_{ki}\}$ 为因子的水平. 若仅考虑因子的主效应，其回归模型是线性的:

$$EY=\beta_0+\beta_1x_1+\cdots+\beta_sx_s, \tag{5.3.1}$$

其中系数 $\beta_0,\beta_1,\cdots,\beta_s$ 能够估出. 对回归系数作假设检验

$$H_0:\beta_i=0,\qquad H_1:\beta_i\neq 0. \tag{5.3.2}$$

若假设被否定，则第 i 个因子的主效应对 Y 是显著的，否则 x_i 可从模型中删去.

如果进一步还要考虑因子的二阶主效应和交互效应，则最简单的模型为

$$EY = \beta_0 + \sum_{i=1}^{s} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=i}^{s} \beta_{ij} x_i x_j. \tag{5.3.3}$$

当 s 较大时，(5.3.3) 中的项数太多，用来作预报效果不好，需要将作用不大的项从模型中去掉，这可利用回归分析中诸多筛选变量的方法，例如 **逐步回归** 和 **回归的最优子集方法** (Seber, 1977). 如果在最终的模型中有项 x_i, 则表明因子 x_i 的一阶主效应显著；若 $x_i x_j$ 出现在模型中，表明因子 x_i 和 x_j 的二阶交互作用显著；若 x_i^2 在模型中，表明因子 x_i 的二阶主效应显著.

在有些情况下我们需要考虑高阶主效应和交互效应，例如 $x_i^3, x_i^2 x_j, x_i x_j x_k$ 等，这时 (5.3.3) 的右边将有更多的项，变量的筛选就更为重要.

例 5.2 (继续) 由表 5.4 给出的 17 组解经 3 个小时的处理后，Reuber H35 的死亡率结果如表 5.7 所示. 对每个解，准备了的三个碟子，试验重复进行三次. 结果记为 Y_1, Y_2 与 Y_3, 它们的均值记为 $\overline{Y}$ (表 5.7).

为了说明回归分析在 UD 中的应用，我们仅处理 $\overline{Y}$, 并且略去细节. 由于每个因子的变化范围较大，所以我们用 log(Cd), $\cdots$, log(Pb) 分别代替 Cd, $\cdots$, Pb. 考虑回归模型 (5.3.3) 而且用逐步回归来选择变量. 最后的回归方程为

$$\begin{aligned}\hat{Y} = {} & 32.68 + 5.03\log(\text{Cd}) + 3.48\log(\text{Cu}) + 2.03\log(\text{Ni}) \\ & + 0.55(\log \text{Cu})^2 - 0.63(\log \text{Zn})^2 + 0.94(\log \text{Ni})^2 \\ & + 0.53\log(\text{Cd})\log(\text{Cu}) - 0.70\log(\text{Cd})\log(\text{Cr}) \\ & + 0.92\log(\text{Cu})\log(\text{Pb}).\end{aligned}$$

方程中的每一项的 t- 值分别是 11.5, 7.8, 4.9, 2.6, −3.4, 4.1, 2.4, −2.8, 5.3, 所以方程是可以接受的. 结果表明 Cd 是导至细胞死亡的最毒的化学物. $(\log(\mathrm{Zn}))^2$ 的系数为负的，这表明 Zn, 对其他金属的毒性起中和作用. Cd 与 Cu, Cd 与 Cr, 及 Cu 与 Pb 间的效应是显著的.

表 5.7 死亡率

Y_1	Y_2	Y_3	$\overline{Y}$
17.95	17.65	18.33	17.90
22.09	22.85	22.62	22.50
33.74	32.79	32.87	32.40
39.37	40.65	37.87	39.30
31.90	31.18	33.75	32.20
31.14	30.66	31.18	31.00
39.81	39.61	40.80	40.00
42.48	41.86	43.79	42.70
24.97	24.65	25.05	24.80
50.29	51.22	20.54	50.60
60.71	60.43	59.69	60.20
67.01	71.99	67.12	68.70
32.77	30.86	33.70	32.40

下面的例子将给出 UD 与正交设计的比较.

例 5.3 在维尼纶 (一种化纤衣料的原料) 生产的设计中，考虑如下的因子

A: 温度 (°C)

B: 时间 (分)

C: 甲烷浓度 (g/l)

D: 硫酸浓度 (g/l)

E: 芒硝浓度 (g/l).

因子 A, B, C, D 各有 7 个水平， E 只有 3 个水平，我们推荐用 **拟水平法** 使 E 也有 "7" 个水平，详见表 5.8.

表 5.8 因子和水平

	1	2	3	4	5	6	7
A(°C)	64	66	68	70	72	74	76
B (m)	14	16	18	20	22	24	26
C (g/l)	18	20	22	24	26	28	30
D (g/l)	206	212	218	224	230	236	242
E (g/l)	70	70	85	85	85	100	100

工程师曾用正交设计做了 49 个试验 (方开泰等 (1973)), 由于交互效应不显著, 他们获得了如下的回归方程

$$EY = -42.37 + 0.55A + 0.38B + 0.26C + 0.10D - 0.04E, \quad (5.3.4)$$

其全相关系数 $R = 0.97$, 残差标准差 $\hat{\sigma} = 0.83$. 这里 Y 代表维尼纶的质量. 若用 $U_{14}(14^5)$ 来代替正交表, 此处 $U_{14}(14^5)$ 是通过删去表 $U_{15}(15^5)$ 的最后一行而获得. 由附录 A.2, 当 $n = 14, s = 5$ 时推荐的 $\boldsymbol{h}$ 为 (1, 2, 4, 7, 13) 其试验方案和 y 值列于表 5.9. 由于每个因子的水平少于 14 个, 我们用拟水平法来安排 14 个试验, 即将原来的 7 个水平重复一次, 人为地扩展为 14 个水平. 例如表 5.9 中, 因子 A, B, C, D 的水平 1, 2 为原来的水平 1, 水平 13, 14 为原来的水平 7, $\cdots$. 类似地, 可以处理因子 E.

利用含有随机误差 $\varepsilon \sim N(0, 0.83)^2$ 的线性回归模型 (5.3.4), 由蒙特卡罗模拟可得效应 Y, 其值列于表 5.9 中, 由此得回归方程

$$EY = -57.97 + 0.37A + 0.46B + 0.38C + 0.17D + 0.04E, \quad (5.3.5)$$

其中 $R = 0.96$, $\hat{\sigma} = 1.13$. 进一步利用方程 (5.3.5) 来预报工程师们做的 49 次试验, 其预报的残差均值和标准差分别为

$$\bar{x}_{res} = -0.00816, \qquad \hat{\sigma}_{res} = 1.734,$$

效果是相当不错的, 而均匀设计仅用了原来的正交设计的 $14/49 = 28.57\%$ 的试验.

表 5.9 设计和数据

No	A	B	C	D	E	y
1	$A_1(64)$	$B_2(14)$	$C_4(20)$	$D_7(224)$	$E_{13}(100)$	24.08
2	$A_2(64)$	$B_4(16)$	$C_8(24)$	$D_{14}(242)$	$E_{11}(100)$	28.59
3	$A_3(66)$	$B_6(18)$	$C_{12}(28)$	$D_6(218)$	$E_9(85)$	27.88
4	$A_4(66)$	$B_8(20)$	$C_1(18)$	$D_{13}(242)$	$E_7(85)$	27.99
5	$A_5(68)$	$B_{10}(22)$	$C_5(22)$	$D_5(218)$	$E_5(85)$	27.77
6	$A_6(68)$	$B_{12}(24)$	$C_9(26)$	$D_{12}(236)$	$E_3(70)$	31.21
7	$A_7(70)$	$B_{14}(26)$	$C_{13}(30)$	$D_4(212)$	$E_1(70)$	30.83
8	$A_8(70)$	$B_1(14)$	$C_2(18)$	$D_{11}(236)$	$E_{14}(100)$	25.67
9	$A_9(72)$	$B_3(16)$	$C_6(22)$	$D_3(212)$	$E_{12}(100)$	25.31
10	$A_{10}(72)$	$B_5(18)$	$C_{10}(26)$	$D_{10}(230)$	$E_{10}(85)$	31.53
11	$A_{11}(74)$	$B_7(20)$	$C_{14}(30)$	$D_2(206)$	$E_8(85)$	28.03
12	$A_{12}(74)$	$B_9(22)$	$C_3(20)$	$D_9(230)$	$E_6(85)$	31.31
13	$A_{13}(76)$	$B_{11}(24)$	$C_7(24)$	$D_1(206)$	$E_4(70)$	29.16
14	$A_{14}(76)$	$B_{13}(26)$	$C_{11}(28)$	$D_8(224)$	$E_2(70)$	36.39

§ 5.4 设计均匀性的度量

在 §5.2.3 我们曾提及有许多方法来度量设计矩阵的均匀性. 可将这些方法分类为：数论方法、几何方法和统计方法. 在 §5.2 我们已介绍了数论方法. 本节将介绍其它两种方法：

5.4.1 几何方法

(a) 体积距离方法

令 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_{(1)},\cdots,\boldsymbol{a}_{(n)})'=(a_{ij})$ 为 §5.2 定义的设计矩阵，称

$$v_{jk}(\boldsymbol{A})=\prod_{l=1}^{s}|a_{kl}-a_{jl}| \tag{5.4.1}$$

为 $\boldsymbol{A}$ 的试验点 $\boldsymbol{a}_{(j)}$ 和 $\boldsymbol{a}_{(k)}$ 之间的**体积距离**. 显然，$v_{jk}=v_{kj}$，$v_{jj}=0$. 通过点 $\boldsymbol{a}_{(j)}$ 和 $\boldsymbol{a}_{(k)}$ 作平行于坐标平面的 $2s$ 个超平面，

$1 \le j < k \le n$, 这些超平面所围成的矩形的体积恰为 $v_{jk}(\boldsymbol{A})$. 蒋声和陈瑞琛 (1987) 建议用

$$U_2(\boldsymbol{A}) = \min_{1 \le j < k \le n} v_{jk}(\boldsymbol{A}) \tag{5.4.2}$$

来度量 $\boldsymbol{A}$ 的均匀度. 另一方面, 方开泰与张金廷 (1992) 建议用

$$U_3(\boldsymbol{A}) = \sum_{1 \le j < k \le n} (v_{jk}(\boldsymbol{A}) - \bar{v}(\boldsymbol{A}))^2 \tag{5.4.3}$$

来作为均匀度的度量; 此处

$$\bar{v}(\boldsymbol{A}) = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{1 \le j < k \le n} v_{jk}(\boldsymbol{A}) \tag{5.4.4}$$

若 $U_2(\boldsymbol{A}) \ge U_2(\boldsymbol{B})$ (或 $U_3(\boldsymbol{A}) \ge U_3(\boldsymbol{B})$), 则称由 $\boldsymbol{A}$ 所定义的集合比由 $\boldsymbol{B}$ 所定义的集合散布更均匀. 从几何观点来看, 这个度量是自然的: 若试验点在 $[1, n]^s$ 中散布均匀, 则任何两个 $v_{jk}(\boldsymbol{A})$, 的差应较小. 方开泰和张金廷 (1992) 指出, $U_3(\boldsymbol{A})$ 通常比 $U_2(\boldsymbol{A})$ 好.

(b) **最大对称差准则**

我们用图 5.1 来说明一个设计矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的对称差的几何意义. 该图表示有两个因子 A 和 B 时 $U_7(7^2)$ 的试验点图. 从因子 A 的观点来看, B 的相邻水平差的绝对值和等于

$$|6-3| + |2-6| + |5-2| + |1-5| + |4-1| + |7-4| = 20.$$

另一方面, 从 B 的观点, A 的相邻水平的差的绝对值和为

$$|3-5| + |1-3| + |6-1| + |4-6| + |2-4| + |7-2| = 18.$$

这两个因子的对称差定义为 $SD = 20 + 18 = 38$. 直观上可以看出, SD 越大, 试验点散布越均匀. 现在我们给出 **对称差** 的数

学定义.

对任一自然数 n, 令

$$\mathcal{A}_n=\{(i_1,\cdots,i_n):(i_1,\cdots,i_n)\ \text{是}\ (1,\cdots,n)\text{的一个置换}\}. \tag{5.4.5}$$

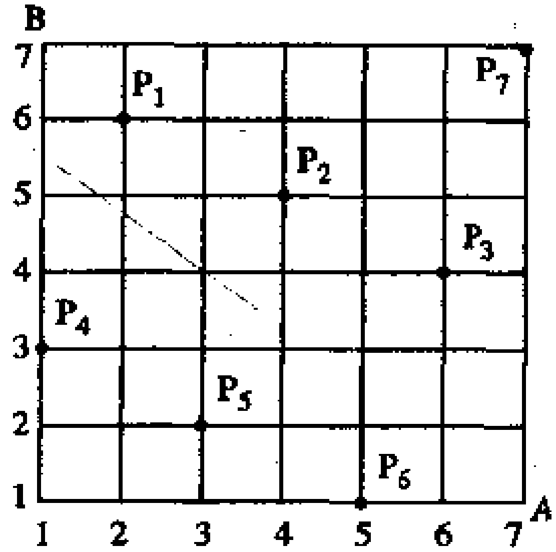


图 5.1

定义 5.3 设 $\boldsymbol{x}=(i_1,\cdots,i_n)$ 和 $\boldsymbol{y}=(j_1,\cdots,j_n)$ 均属于 $\mathcal{A}_n$. 则存在一个矢量 $(l_1,\cdots,l_n)\in\mathcal{A}_n$ 使得 $i_{l_1}=1,\cdots,i_{l_n}=n$. 则称

$$ND(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\sum_{k=1}^{n-1}|j_{l_{k+1}}-j_{l_k}| \tag{5.4.6}$$

为基于 $\boldsymbol{x}$ 的 $\boldsymbol{y}$ 的一步邻差和，以及

$$SD(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=ND(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})+ND(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) \tag{5.4.7}$$

为 $\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 的一步对称差，或简称对称差.

例 5.4 由图 5.1 的例有 $\boldsymbol{x}=(2,4,6,1,3,5,7)$, $\boldsymbol{y}=(6,5,4,3,2,1,7)$. 则 $(l_1,\cdots,l_7)=(4,1,5,2,6,3,7)$, 这是由于 $i_4=1$, $i_1=2,\cdots,i_7=7$. 我们有 $\boldsymbol{y}\to\boldsymbol{y}^*=(3,6,2,5,1,4,7)$, 由 (5.4.6)

$$ND(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = |6-3| + |2-6| + \cdots + |7-4| = 20.$$

类似地 $ND(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) = 18$, 及 $SD(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = 38$.

我们引进矢量 $(l_1, \cdots, l_m)$ 的目的，是将试验点按其 x 坐标排序，因此 $ND(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 为 $\boldsymbol{y}$ 坐标一步邻差的绝对值和， $ND(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})$ 有类似的意义. 若 n 个点要求散布均匀，则它们的对称差应尽可能地大，这就是所谓的**最大对称差准则** (MSD). 高维情形的对称差可以定义如下：

定义 5.4 $\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{A}_n$, $i = 1, \cdots, s$, 则 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_s$ 的对称差定义为

$$SD(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_s) = \sum_{1 \le i < j \le s} SD(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j). \tag{5.4.8}$$

运用最大对称差准则，可求得在 (5.2.10) 中定义的最好的 b 和相应的 UD. 为了简化对称差的计算，我们给出对称差的一些性质：

(i) $SD(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = SD(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) = SD(\boldsymbol{x}, n+1-\boldsymbol{y})$ 对一切 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathcal{A}_n$ 成立，其中 $n+1-\boldsymbol{y} = (n+1-j_1, \cdots, n+1-j_n)$ 及 $\boldsymbol{y} = (j_1, \cdots, j_n)$.

该性质可由定义直接导出，故略去证明.

若 a 为介于 $0 < a < n$ 的整数，则由 glp 集的定义，有

$$j_1 = a, \, j_2 = 2a, \cdots, j_n = na \ (\mathrm{mod} n).$$

相应的 $\boldsymbol{y}$ 表为 $\boldsymbol{y}_a = (j_1, \cdots, j_n)$. 类似地有 $\boldsymbol{x}_b = (b, 2b, \cdots, nb)$ $(\mathrm{mod}\ n)$, 特别， $\boldsymbol{x}_1 = (1, 2, \cdots, n)$. 下面关于对称差的一些性质来自方开泰和郑胡灵 (1992).

(ii) $SD(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_a) = SD(\boldsymbol{x}_b, \boldsymbol{y}_1)$, 其中 $b \equiv a^{-1} (\mathrm{mod}\ n)$.

(iii) $SD(\boldsymbol{x}_a, \boldsymbol{y}_c) = SD(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_{a^{-1}c})$.

(iv) $SD(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_a) = (2a-1)(n-a) + (2b-1)(n-b),$ (5.4.9)

其中 $b \equiv a^{-1} \pmod n$.

公式 (5.4.9) 提供了计算对称差的公式. 在例 5.3 中, 有 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_2$, 和 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}_6$, $n = 7$, 因 $2^{-1} \equiv 4 \pmod 7$, $3^{-1} \equiv 5 \pmod 7$ 由 (5.4.9) 得

$$
\begin{aligned}
SD(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) &= SD(\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y}_6) = SD(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_{4\times 6}) \\
&= SD(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y}_3) \\
&= (2\times 3 - 1)(7-3) + (2\times 5 - 1)(7-5) \\
&= 20 + 18 = 38,
\end{aligned}
$$

这和以前的结果是一致的.

(v) 若 $(a_m, n) = 1$, $m = 1, \cdots, s$, 则对任意的 $(j_1, \cdots, j_s) \in \mathcal{A}_s$ 有

$$
\begin{aligned}
&SD(\boldsymbol{x}_{a_1}, \cdots, \boldsymbol{x}_{a_s}) \\
=&SD(\boldsymbol{x}_{a_{j_1}}, \cdots, \boldsymbol{x}_{a_{j_s}}) \\
=&SD(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_{a_1^{-1}a_2}, \cdots, \boldsymbol{x}_{a_1^{-1}a_s}).
\end{aligned} \tag{5.4.10}
$$

因此我们总可假定 $h_1 = 1$, 这和偏差准则的结果一致. 方开泰和郑胡灵 (1992) 通过对 $4 \le n \le 31$ 的计算表明, 最大对称差准则和偏差准则在大部分情形下获得的 "最好的" $\boldsymbol{h}$ 是相同的, 而最大对称差准则更为初等. 由于高维的对称差是通过二维的对称差来定义 ((5.4.8)), 因此在高维时对称差所获得的解可能不是最优的. 表 5.10 列出最大对称差和偏差准则获得的结果的比较. 我们看到当 $n \le 11$ 时两者完全一致, 随着 n 增加时两者的差异也增加.

表 5.10 两种方法的比较

		最大对称差	偏差
n	s	$h_2,h_3,\cdots,h_s$	$h_2,h_3,\cdots,h_s$
13	3	4,5	3,4
	4	3,5,11	6,8,11
	5	3,4,5,11	6,8,9,10
15	3	2,4	3,4
	4	2,4,6	3,4,7
	5	2,3,4,6	2,3,4,7
19	4	7,8,18	6,8,14
	5	7,8,11,18	6,8,14,17
	6	7,8,11,12,18	6,8,10,14,17
21	5	3,6,8,9	3,6,9,11
	7	2,3,6,8,9,11	3,6,8,9,11,12
23	2	13	7
	3	8,13	13,17
25	2	11	11
	4	5,9,13	5,9,17
	8	4,5,8,9,13,16,20	2,7,10,12,15,16,17
27	2	7	6
	3	7,13	6,7
	4	6,7,18	6,14,15
	5	5,9,11,13	6,14,15,17
	6	6,7,12,13,18	6,10,14,15,17
	8	6,7,8,10,14,15,17	3,5,7,9,11,13,17
	9	3,6,7,8,10,14,15,17	3,5,7,9,11,13,15,17
29	3	16,24	9,23
	6	13,15,19,21,24	7,16,23,24,25
	7	13,15,19,21,22,24	7,16,20,23,24,25
	8	12,13,15,19,21,22,24	6,7,8,13,17,19,27
	9	12,13,15,19,21,22,24,25	6,7,8,13,17,19,20,27
	10	11,12,13,15,19,21,22,24,25	6,7,8,13,15,17,19,20,27
	11	6,11,12,13,15,19,21,22,24,25	4,6,7,8,13,15,17,19,20,27
	12	3,5,8,12,13,14,18,19,20,22,23	3,4,6,7,8,13,15,17,19,20,27

5.4.2 统计方法

设用 glp 集产生了一个设计矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 或诱导阵 $\boldsymbol{X}$. 如果把 $\boldsymbol{X}$ 看成 s 维观测值矩阵，则样本均值和样本协差阵分别为

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\mathbf{1}_n \qquad \text{和} \qquad \boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}) \doteq \frac{1}{n}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{D}_n\boldsymbol{X}, \tag{5.4.11}$$

其中

$$\boldsymbol{D}_n = \boldsymbol{I}_n - \tfrac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n', \qquad \mathbf{1}_n = (1, \cdots, 1)' : n \times 1.$$

令 $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$ 为 $\boldsymbol{S}$ 的特征值，可以指出

$$\sum_{i=1}^{s} \lambda_i = \mathrm{tr}\,(\boldsymbol{S}) \doteq \frac{s}{12}\Big(1 - \frac{1}{n^2}\Big).$$

在最优回归设计中所有的准则都是 $\{\lambda_i\}$ 的函数，如最小、最大、算术平均、几何平均和方差等函数. 这促使我们推广最优回归设计的准则如下：

令 $ID = \{e_i; e_i > 0, i = 1, \cdots, m\}$ 是 $\boldsymbol{Q}$ 或 $\boldsymbol{X}$ 的导出集，它含有 $\boldsymbol{Q}$ 均匀性的信息. 例如 $ID = \{\lambda_i, i = 1, \cdots, s\}$. 考虑 **ID** 函数:

$$\begin{aligned}
ID_{\min}(\boldsymbol{Q}) &= \min_{1\leq i\leq m} e_i, \\
ID_{\max}(\boldsymbol{Q}) &= \max_{1\leq i\leq m} e_i, \\
ID_{\mathrm{mean}}(\boldsymbol{Q}) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} e_i = \bar{e}, \\
ID_{\mathrm{gmean}}(\boldsymbol{Q}) &= \Big(\prod_{1}^{m} e_i\Big)^{1/m}, \\
ID_{\mathrm{var}}(\boldsymbol{Q}) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(e_i - \bar{e})^2.
\end{aligned} \tag{5.4.12}$$

$\boldsymbol{Q}$ 的集合 ID 和 ID 函数应当满足如下两个条件：

(a) 若 $\boldsymbol{Q}_1 \approx \boldsymbol{Q}_2$ (§5.2), 则 $ID(\boldsymbol{Q}_1) = ID(\boldsymbol{Q}_2)$. 这就是说，若 $\boldsymbol{Q}_1$ 和 $\boldsymbol{Q}_2$ 等价，则它们应有相同的导出集.

(b) 令 $ID_f(\boldsymbol{Q})$ 是 ID 集上的一个 ID 函数. 倘若 $\boldsymbol{Q}_1 \approx \boldsymbol{Q}_2$, 则 $ID_f(\boldsymbol{Q}_1) = ID_f(\boldsymbol{Q}_2)$.

这两个性质对均匀性度量显然是十分必要的. 当 $ID = \{\lambda_i\}$ 且 ID_f 为 (5.4.12) 中任一函数时, 性质 (a) 和 (b) 都是满足的. 方开泰和张金廷 (1992) 建议了好几种导出集，并给出了它们的性质.

设计阵 $\boldsymbol{Q}^*$ 称为均匀设计，若它满足下面的条件之一：

$$
\begin{aligned}
ID_{\min}(\boldsymbol{Q}^*) &= \max_{\boldsymbol{Q}} ID_{\min}(\boldsymbol{Q}),\\
ID_{\max}(\boldsymbol{Q}^*) &= \min_{\boldsymbol{Q}} ID_{\max}(\boldsymbol{Q}),\\
ID\text{mean}(\boldsymbol{Q}^*) &= \min_{\boldsymbol{Q}} ID\text{mean}(\boldsymbol{Q}),\\
ID\text{gmean}(\boldsymbol{Q}^*) &= \max_{\boldsymbol{Q}} ID\text{gmean}(\boldsymbol{Q}),\\
ID\text{var}(\boldsymbol{Q}^*) &= \min_{\boldsymbol{Q}} ID\text{var}(\boldsymbol{Q}),
\end{aligned}
\tag{5.4.13}
$$

其中 ID 不等于常数. 丁元 (1986) 利用 $ID\text{gmean}$，给出了相应的均匀设计，在最优设计理论中称为 $\boldsymbol{D}$ 最优. 她还用了 $\boldsymbol{A}$ 最优准则, 相应的 ID 函数为

$$
ID_A(\boldsymbol{Q}) = \sum_{i=1}^{s} \lambda_i^{-1}. \tag{5.4.14}
$$

她的数值结果指出，由这两个准则获得的均匀设计在大多数情形下同于用近似偏差 (5.2.8) 所获得的设计，但在一些情形下仍有差别. 表 5.11 对于 $n \le 19$ 时给出了三种准则的差别，我们看到由 A 最优和近似偏差所获得的解在许多情形下是不同的，例如 $(n, s) = (7, 4), (11, 6), (13, 7), (15, 5), (17, 9), (19, 10)$ 等. 用 A 最优和 D 最优准则在许多情形下获得相同的解，但其解不同于偏差准则，例如 $(n, s) =(5, 2), (11, 2), (13, 2), (13, 3), (17, 2)$ $(19, 2), (19, 3)$ 等.

表 5.11 生成矢量 ($h_1=1$)

n	s	A最优	D最优	近似偏差
5	2	4	4	2
7	4	2,4,6	2,3,6 (or 2,4,6)	2,3,6
9	4	2,4,5	2,3,5	2,3,5
11	2	5	5	7
11	6	2,4,5,8,10	2,4,5,8,10 (or 2,3,5,7,10)	2,3,5,7,10
13	2	6	6	5
13	3	6,10	6,10	3,4
13	7	2,3,4,6,8,12	2,3,4,6,8,12 (or 2,6,8,9,10,12)	2,6,8,9,10,12
15	5	2,3,5,7	2,3,5,7 (or 2,3,4,7)	2,3,4,7
17	2	11	11	10
17	9	3,5,9,10, 11,13,15,16	3,5,9,10,11,13,15,16 (or 4,5,6,9,10,14,15,16)	4,5,6,9, 10,14,15,16
19	2	6	6	8
19	3	6,14	6,14	7,8
19	10	3,5,6,10, 11,12,15,17,18	3,5,6,10,11,12,15,17,18 (or 3,4,6,7,8,10,14,17,18)	3,4,6,7,8, 10,14,17,18

我们已经介绍了许多均匀性度量，如何比较它们的好坏，这是一个困难的问题. 方开泰和张金廷 (1992) 对 4 种导出集和 20 种均匀性度量和偏差 (精确值) 在 $s\le 5$ 和 $n\le 31$ 时作了比较，他们给出了如下的结论：在 (5.4.12) 定义的五种 ID 函数中，$ID\text{var}$ 对均匀度的度量其功效最好，因此是最好的函数；而 (5.2.8) 对均匀度的度量功效较差. 在四个导出集中，以 $ID=\{\lambda_i\}$ 为最好. 因此，当 n 较小时他们建议用

$$ID\text{var}(\boldsymbol{Q})=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{s}(\lambda_i-\bar{\lambda})^2,\qquad \bar{\lambda}=\frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s}\lambda_i$$

或

$$U_4(\boldsymbol{Q}) = \sum_{i=1}^{s}(\lambda_i - \bar{\lambda})^2 \tag{5.4.15}$$

作为均匀性的度量. 若 $\boldsymbol{Q}$ 的生成矢量有形式 (5.2.10), 当 $n \le 31, s \le n/2+1$ 时，利用 U_4 可求得最好的 b, 其结果列于表 5.12, 对于想采用均匀设计的读者，我们向他推荐表 5.12.

另一个均匀性度量是均方差 (MSE), 在第四章已经详细讨论. 利用 NTLBG 算法， UD 的生成矢量，他们列于附录 A.2.

表 5.12 在 U_4 准则下均匀设计的最好的 b

	因子数														
n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
5	2	2													
7	3	3	3												
9	4	4	2												
11	5	7	7	7	7										
13	6	6	6	6	6	6									
15	7	7	7												
17	11	10	10	10	10	10	10								
19	6	14	14	14	14	14	14	14	14						
21	5	5	10	10	10	10	10	10	10	10					
23	9	17	15	17	17	20	20	11	11	11	11				
25	11	11	11	11	8	8	8	8	8	8					
27	16	20	20	20	20	20	20	16							
29	7	13	23	25	25	7	11	11	11	14	14	14	14	19	
31	14	22	12	12	12	12	12	12	12	22	22	22	22	22	22

§ 5.5 混料均匀设计

所谓 s 个因子的混料设计，就是这些因子 $x_1, \cdots, x_s$ 满足 $x_i \ge 0, i = 1, \cdots, s$, 及 $x_1 + \cdots + x_s = 1$. 混料设计常常出现在化学和材料工业设计，食品配方等. 在过去的 30 年中，发表了许多文章，提出了各种混料设计的方法. Scheffé (1958) 引进了单

纯形格子点设计和相应的多项式模型. 随后, 他 (1963) 又提出了另一个称之为 **单纯形重心设计**. Cornell (1975) 建议了 **轴设计**, 他 (1973, 1981) 综合了几乎所有的关于混料设计的统计文章和有关的数据分析.

首先, 我们介绍单纯形格子点、单纯形重心和轴设计.

(a) 单纯形格子点设计

设有 s 种原料进行配方. 令 m 为正整数, 若每种原料从 0 至 1 均匀地取 $(m+1)$ 个值, 即

$$x_i = 0, 1/m, 2/m, \cdots, 1, \qquad i = 1, \cdots, s.$$

例如, 当 $s = 3$, 我们有

$$\begin{aligned}
m = 1: &\ 3\text{个设计点}(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1);\\
m = 2: &\ 6\text{个设计点}(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1),\\
&\qquad (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2);\\
m = 3: &\ 10\text{个设计点}(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (1/3,2/3,0),\\
&\qquad (1/3,0,2/3), (0,1/3,2/3), (2/3,1/3,0),\\
&\qquad (2/3,0,1/3), (0,2/3,1/3), (1/3,1/3,1/3).
\end{aligned}$$

一般地有 $\binom{s+m-1}{m}$ 个设计点, 并用记号 $\{s, m\}$ 表示这个设计.

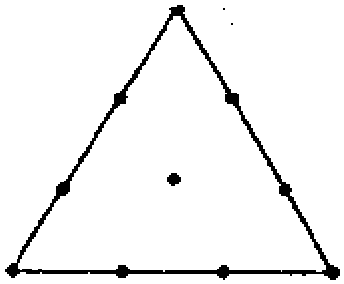
(b) 单纯形重心设计

s 个分量的单纯形重心设计由下列点组成: s 个单一原料配方, $\binom{s}{2}$ 个二种原料配方, $\binom{s}{3}$ 个三种原料配方, $\cdots$, 以及加上重心点 $(1/s, \cdots, 1/s)$. 所以设计总数为 $2^s - 1$. 例如, 当 $s = 3$ 时, 设计点有 (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2) 及 (1/3, 1/3, 1/3).

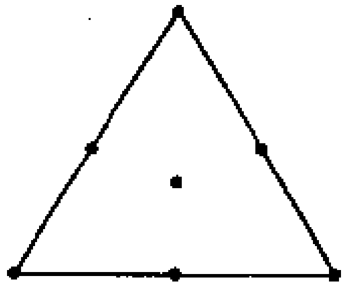
(c) 轴设计

由单纯形 T_s 的顶点和重心的连线称为一个 **轴**. 令 d 为一个正数, 介于 $0 < d < (s-1)/s$. 轴设计由 s 个点组成, 它们分别位于 s 个轴上, 到重心有相同的距离 d.

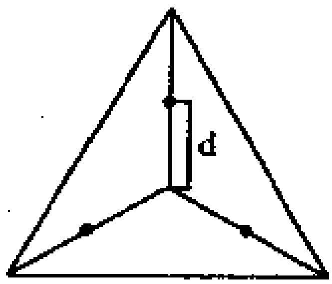
图 5.2 给出 $s=3$ 时上述三种设计. 读者将发现在这三种设计中至少存在两个问题：



(a) 单纯形格子点设计



(b) 单纯形重心设计



(c) 轴设计

图 5.2

(i) 试验点在试验区域 T_s 内散布并不十分均匀.

(ii) 一些试验点在试验区域的边界上. 在一些化学试验中，如果缺少一些原料，试验是不可能进行的，在这种情形下，落在边界上的试验点是没有意义的.

因此，我们需要一种试验设计，其试验点在 T_s 上均匀散布，这正是均匀设计的思想，相应的设计称为**混料均匀设计** (UDEM). 本节我们将介绍三类这样的设计.

5.5.1 Scheffè 型设计

由图 5.2 看到，由 Scheffè 提出的单纯形重心设计试验点在 T_s 上的散布是均匀的，但边界上的点太多. 因此，在 T_s 边界上

的每个试验点应当挪到 T_s 内部．一个自然的想法是保持原设计中点散布的形状，把边界点向 T_s 的重心压缩．我们以 $s=3$ 时的单纯形重心设计为例来说明这个方法．设原来的设计由图 5.2 (b) 给出，令 a 是一个待定的正数．然后将单纯形的三个顶点向重心移动如下：

$$
\begin{aligned}
(1,0,0) &\longrightarrow \left(1-\frac{1}{a},\frac{1}{2a},\frac{1}{2a}\right),\\
(0,1,0) &\longrightarrow \left(\frac{1}{2a},1-\frac{1}{a},\frac{1}{2a}\right),\\
(0,0,1) &\longrightarrow \left(\frac{1}{2a},\frac{1}{2a},1-\frac{1}{a}\right),
\end{aligned}
\tag{5.5.1}
$$

从而其它四点的位置为

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right) &\longrightarrow \left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4a},\frac{1}{2}-\frac{1}{4a},\frac{1}{2a}\right),\\
\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right) &\longrightarrow \left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4a},\frac{1}{2a},\frac{1}{2}-\frac{1}{4a}\right),\\
\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) &\longrightarrow \left(\frac{1}{2a},\frac{1}{2}-\frac{1}{4a},\frac{1}{2}-\frac{1}{4a}\right),\\
\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right) &\longrightarrow \left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)
\end{aligned}
$$

如图 5.3 所示．我们希望求一个适当的 a 使这七个点在 T_s 内散布均匀．

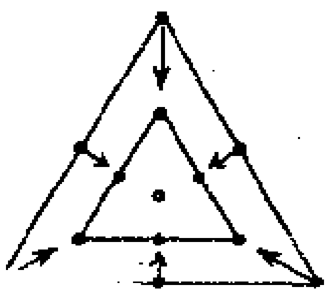


图 5.3 试验点的收缩

在第四章我们曾提出了两个均匀度： F 偏差和 MSE 方法来度量一个集合的均匀性．由于 MSE 比较容易计算，故这里我

们采用 MSE 来度量试验点的均匀性. 为方便读者，我们将计算 MSE 的主要步骤重述如下 (参第四章):

令 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 为 T_s 的 n 个试验点.

(a) 利用 (1.5.33) 在 T_s 产生一个 NT-net $\boldsymbol{y}_1,\cdots,\boldsymbol{y}_N$, 这 N 个点称为 **训练样本**.

(b) 点集 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ 在 T_s 上的 MSE 近似等于

$$\begin{aligned}\mathrm{MSE}\{\boldsymbol{x}_i\} &\cong \frac{v(T_s)}{sN}\sum_{i=1}^{N}\min_{1\le j\le n} d^2(\boldsymbol{x}_j,\boldsymbol{y}_i)\frac{1}{v(T_s)} \\ &= \frac{1}{sN}\sum_{i=1}^{N}\min_{1\le j\le n} d^2(\boldsymbol{x}_j,\boldsymbol{y}_i). \end{aligned} \tag{5.5.2}$$

注意，这里 MSE 的定义与以前略有不同 ((1.4.15)), 这里多除了一个 s, 来表示不同维之间的差别.

设 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_7$ 为单纯形重心设计在 $s=3$ 时的七个点，取 $N=610, h_1=1, h_2=377$, 由 (N,h_1,h_2) 产生 glp 集，利用 (1.5.33) 和 (5.5.2), 求得 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ 的 MSE 为 0.05553. 将压缩后的七个点记为 $\boldsymbol{x}_1^*,\cdots,\boldsymbol{x}_7^*$, 它们的 MSE 是 a 的函数，由数值计算求得使 MSE 达到极小的 $a=3.761$, 相应的 MSE 为 0.02296, 比原来的 MSE =0.05553 有显著的改进. 于是压缩后的改进设计为

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}_1^*=(0.734,0.133,0.133), &&\boldsymbol{x}_2^*=(0.133,0.734,0.133),\\
&\boldsymbol{x}_3^*=(0.133,0.133,0.734), &&\boldsymbol{x}_4^*=(0.4335,0.4335,0.133),\\
&\boldsymbol{x}_5^*=(0.4335,0.133,0.4335), &&\boldsymbol{x}_6^*=(0.133,0.4335,0.4335),\\
&\boldsymbol{x}_7^*=(1/3,1/3,1/3).
\end{aligned}$$

类似的方法可以用来改进单纯形格子点设计. 例如，利用 (5.5.1) 可算得设计 $\{3,3\}$ 的 MSE 为 0.03087. 经压缩后，它在 $a=4.836$ 时 MSE 达最小值 0.01568. 为读者对照方便，表 5.13 汇总了上述结果，其试验点如图 5.4 所示. 对于一般情形，读者不难用上面的方法获得其相应之改进设计.

表 5.13 改进的 Scheffé 设计

设计	原来的 MSE	改进的 MSE	a
单纯形重心设计	0.05553	0.02296	3.761
单纯形格子点设计 $\{3,3\}$	0.03087	0.01568	4.836

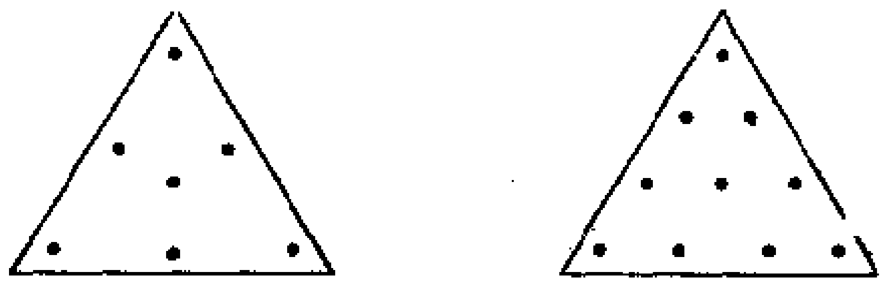


图 5.4 Scheffé 型设计

我们也可求得 d 使得相应的轴设计有最小的 MSE.

5.5.2 均匀设计 —— 偏差准则

改进的 Scheffé 设计虽然解决了试验点落在边界上的问题，从图 5.4 直观地看试验点在 T_s 内尚不够散布均匀. 此外，Scheffé 的两种设计对试验点数限制很死，如单纯形格子点设计，设计点数必须形如 $\binom{s+m-1}{m}$, 如用单纯形重心设计，试验点数必须形如 2^s-1; 轴设计的试验点为 s 个. 而在大部分工业和化学试验中，由于客观条件千变万化，需要设计有相当的灵活性，不宜把试验数目限制过死. 为此，王元和方开泰 (1990b) 提出了所谓混料均匀设计 (UDEM), 其思想就是用 §1.5 中引进的在 T_s 上均匀布点的方法给出设计.

设有 s 个因子 $X_1,\cdots,X_s$, 其试验范围为 T_s, 如果要安排 n 个试验，其具体步骤如下：

(a) 由附录 A 查到生成矢量 $(n;h_1,\cdots,h_{s-1})$ 并由此求得一个具有低偏差的 glp 集 $\{\mathbf{c}_k=(c_{k1},\cdots,c_{k,s-1})', \ k=1,\cdots,n\}$.

(b) 置

$$
\begin{aligned}
x_{ki} &= \prod_{j=1}^{i-1} c_{kj}^{\frac{1}{s-j}}\left(1 - c_{ki}^{\frac{1}{s-i}}\right), \qquad i = 1, \cdots, s-1, \\
x_{ks} &= \prod_{j=1}^{s-1} c_{kj}^{\frac{1}{s-j}}, \; k = 1, \cdots, n.
\end{aligned} \tag{5.5.3}
$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k = (x_{k1}, \cdots, x_{ks})', k = 1, \cdots, n\}$ 即为均匀设计的试验点. 例如，当 $n = 11, s = 3$ 时，由附录 A 表 A.13 查到生成矢量为 $\{11; 1, 7\}$, 表 5.14 给出了产生试验点的过程，c_1 和 c_2 两列给出了 $\boldsymbol{c}_k = (c_{k1}, c_{k2})$ 的两个坐标，x_1, x_2 和 x_3 三列是通过 (5.5.3) 计算出的试验点坐标. 以后我们用 $UM_n(n^s)$ 代表所获得的 UDEM 表.

表 5.14 $UM_{11}(11^3)$

No	c_1	c_2	x_1	x_2	x_3
1	1/22	13/22	0.787	0.087	0.126
2	3/22	5/22	0.631	0.285	0.084
3	5/22	19/22	0.523	0.065	0.412
4	7/22	11/22	0.436	0.282	0.282
5	9/22	3/22	0.360	0.552	0.087
6	11/22	17/22	0.293	0.161	0.546
7	13/22	9/22	0.231	0.454	0.314
8	15/22	1/22	0.174	0.788	0.038
9	17/22	15/22	0.121	0.280	0.599
10	19/22	7/22	0.071	0.634	0.296
11	21/22	21/22	0.023	0.044	0.993

例 5.5 考虑回归模型

$$
Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{s} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=i}^{s} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon,
$$

其中 ε 表示随机误差. 因为 $x_1 + \cdots + x_s = 1$, 它能简化为

$$
Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{s-1} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{s-1} \sum_{j=i}^{s-1} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon,
$$

其中 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$. 考虑下面的模型

$$Y = x_1 + x_2 - 3x_1^2 - 3x_2^2 + x_1x_2 + \varepsilon \tag{5.5.4}$$

并取 $\sigma = 0.005$. 通过模拟和运用 $UM_{17}(17^3)$, 获得表 5.15 的数据, 这里 $n = 17, s = 3$. 由最小二乘法求得回归方程如下

$$\begin{aligned} EY = &- 0.0376 + 1.1162x_1 + 1.1197x_2 \\ &- 3.0842x_1^2 - 3.0880x_2^2 + 0.8336x_1x_2 \end{aligned} \tag{5.5.5}$$

它和模型 (5.5.4) 是很接近的. 方程 (5.5.5) 的全相关系数 $R = 0.9999$, 残差标准差 $\hat{\sigma} = 0.0054$, 后者与 $\sigma = 0.005$ 也很接近.

表 5.15 设计 $UM_{17}(17^3)$

No	x_1	x_2	Y
1	0.829	0.076	−1.100
2	0.703	0.253	−0.541
3	0.617	0.102	−0.391
4	0.546	0.307	−0.157
5	0.486	0.045	−0.160
6	0.431	0.284	0.038
7	0.382	0.564	−0.230
8	0.336	0.215	0.146
9	0.293	0.520	−0.103
10	0.252	0.110	0.163
11	0.214	0.439	0.031
12	0.178	0.798	−0.889
13	0.143	0.328	0.134
14	0.109	0.708	−0.644
15	0.076	0.190	0.155
16	0.045	0.590	−0.388
17	0.015	0.029	0.000

当 σ 大时, 我们不能期望获得这么好的结果. 例如, 考虑模型

$$Y = 10 + x_1 - 3x_1^2 - 3x_2^2 + x_1x_2 + \varepsilon, \tag{5.5.6}$$

其中 $\varepsilon \sim N(0,\sigma^2), \sigma = 0.3$. 表 5.16 的数据是利用表 $UM_{15}(15^3)$ 由模拟产生的，相应的回归方程成为

$$EY = 10.0908 + 0.7972x_1 - 3.4542x_1^2 - 2.6733x_2^2 + 0.8884x_1x_2,$$

其中 $R = 0.9003, \hat{\sigma} = 0.2891$. 值得注意的是这个方程和模型 (5.5.6) 有一些偏离，因为在 x_1 和 x_1^2 项之间有较高的相关性，同时 σ 较大.

表 5.16　设计 $UM_{15}\ (15^3)$

No	x_1	x_2	Y
1	0.817	0.055	8.508
2	0.684	0.179	9.464
3	0.592	0.340	9.935
4	0.517	0.048	9.400
5	0.452	0.201	10.680
6	0.394	0.384	9.748
7	0.342	0.592	9.698
8	0.293	0.118	10.238
9	0.247	0.326	9.809
10	0.204	0.557	9.732
11	0.163	0.809	8.933
12	0.124	0.204	9.971
13	0.087	0.456	9.881
14	0.051	0.727	8.892
15	0.017	0.033	10.139

5.5.3　均匀设计 —— MSE 准则

混料设计实际上是选择 $U(T_s)$ 的代表点，选取的原则可以采用 F 偏差，也可以采用 MSE. 在 §4.5 和 §4.6 已经详细介绍了如何在 MSE 准则下求多元分布的代表点. 下面是 NTLBG 算法 (§4.5) 具体用于在 MSE 下求 $U(T_s)$ 的代表点.

(a) 利用 NTM 对均匀分布 $U(T_s)$ 产生一个训练样本 $\mathcal{P} = \{\boldsymbol{y}_j, j = 1, \cdots, N\}$.

(b) 令 $k = 0$, 并输入初始点 $\boldsymbol{X}(k) = \{\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \cdots, \boldsymbol{x}_n^{(k)}\}$.

(c) 若 $\|\boldsymbol{y}_j^{(k)}-\boldsymbol{x}_t^{(k)}\|\le\|\boldsymbol{y}_j^{(k)}-\boldsymbol{x}_i^{(k)}\|(i=1,\cdots,n)$, 将 $\boldsymbol{y}_j$ 归入 t 组 $(1\le t\le n), j=1,\cdots,N$, 相应的指标集记为 $G_t^{(k)}$.

(d) 对每组 $G_i^{(k)}$, 计算样本均值

$$\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}=\frac{1}{N_i}\sum_{j\in G_i^{(k)}}\boldsymbol{y}_j^{(k)},\qquad i=1,\cdots,n,$$

其中 N_i 是 $G_i^{(k)}$ 的序数.

(e) 置 $\boldsymbol{X}(k+1)=(\boldsymbol{x}_1^{(k+1)},\cdots,\boldsymbol{x}_n^{(k+1)})$.

(f) 若 $\boldsymbol{X}(k)\ne\boldsymbol{X}(k+1)$ 则回到第 (c) 步，并用 $k+1$ 代 k; 否则过程停止.

当 N 很大时，停止规则 $\boldsymbol{X}(k)=\boldsymbol{X}(k+1)$ 会导致大量计算，因此我们需要作如下修改：令 ε 为一事先给定的正数. 若

$$\|\boldsymbol{x}_j^{(k)}-\boldsymbol{x}_j^{(k+1)}\|<\varepsilon,\qquad j=1,\cdots,n,$$

则迭代过程中止.

初始点的选择可以有多种方案，这里仅仅考虑两种方法，一种方法是用改进的 Scheffè 设计得到的试验点，另一种方法是用由 UDEM 给出的试验点 (§5.5.2). 但是，后者适用于试验点数为任何正整数 n, 而前者仅仅能用于少数 n. 为了说明，我们将 NTLBG 算法用于两种设计：单纯形重心设计和单纯形格子点设计 {3, 3} 并采用两种初始点，其结果列于表 5.17, 我们得到如下结论： UDEM 的 MSE 比 Scheffè 设计要小得多，这表明 Scheffè 设计的均匀性不好. 它们在运用了 NTLBG 算法之后，无论是哪一类初始点，MSE 都得到改进，相关于 UDEM 的结果亦较好.

当采用 MSE 准则后，我们总是推荐用 UDEM 来选取初始点，然后求得所谓的 USM 表. 例如，表 $\mathrm{USM}_n(n^s)$ 表示一个 n 个点的设计，每个点有 s 个分量. 表 5.18 和 5.19 给出了 $\mathrm{USM}_7(7^3)$ 和 $\mathrm{USM}_{10}(10^3)$, 他们的 MSE 分别为 0.02180 和 0.01457 (表 5.17).

表 5.17 MSE 值的比较

设计	n	原设计的 MSE	改进 Scheffè 设计的 MSE	运用NTLBG 后的 MSE
Simplex-centroid	7	0.05553	0.02296	0.02266
Simplex lattice $\{3,3\}$	10	0.30870	0.01568	0.01457
UDEM	7	0.02720		0.02180
UDEM	10	0.01876		0.01457

表 5.18 $USM_7(7^3)$

0.7440	0.1434	0.1125
0.5201	0.1323	0.3475
0.4112	0.4381	0.1507
0.2941	0.1803	0.5256
0.1347	0.7403	0.1251
0.1226	0.4648	0.4126
0.1048	0.1344	0.7608

表 5.19 $USM_{10}(10^3)$

0.7930	0.0926	0.1144
0.5964	0.3019	0.1017
0.5487	0.1051	0.3462
0.3682	0.3250	0.3068
0.3573	0.5360	0.1067
0.3132	0.1169	0.5699
0.1299	0.3633	0.5068
0.1170	0.7890	0.0940
0.0956	0.1234	0.7810
0.1125	0.5875	0.3000

§ 5.6 电算试验设计

由于流体问题的解析解的复杂性，数值分析方法已使用多年来提供一个近似解. 设有一个设备或过程，它的运行依赖于一个随机矢量 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)$. 例如，考虑一个电路，它的运行依赖于许多参数，其中有一些随机的影响. 有关的数学模型已有讨论 (例如微分方程组), 利用这些数学模型可以在电脑上模拟设备运行的情形. 最常遇到的是估计设备运行中某一变量函数 $h(\boldsymbol{x})$ 的期望值，即我们要估计期望值 $E(h(\boldsymbol{x}))$. 若用样本均值方法，$E(h(\boldsymbol{x}))$ 的估计为

$$\bar{h}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}h(\boldsymbol{x}_k), \tag{5.6.1}$$

其中 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 由蒙特卡罗方法产生. 我们已经知道，(5.6.1) 的效力是不高的. 因此，许多人建议了各种方法来产生 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$, 使得相应的 $\bar{h}$ 比简单随机抽样 (即 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 独立同分布) 有更好的性质. McKay, Beckman 与 Conover (1979) 建议了一种称之为 **拉丁超立体抽样** (**Lating Hypercube Sampling**, 简记为 (**LHS**)), 随后有不少关于 LHS 的讨论并出现了 LHS 的各种变形. 因此，我们可以认为该文的发表作为 **电算试验设计** (**DCE**) 的起点. 一个电算试验由下列组成：设计一个电算程序，有一系列输入，运行程序并给出输出. 输入和输出组成一个观测值. 例如，在上面叙述中，$\{\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 是输入，$\bar{h}$ 是输出. 电算试验设计是如何选择输入使输出有较好性质的方法. 当物理试验太复杂或太贵时，建立在对这个物理体系作数学描叙基础上的电算模型 (或程序) 被采用来代替物理试验. 因此，在过去的 15 年里，人们对电算试验有极大的兴趣. 许多人，如 Welch (1983), Stein (1987), Ylvisaker (1987), Sacks, Schiller 和 Welch (1989), Welch 等 (1989), Draper 与 Lin (1990), Morris (1991), Owen (1992a, b), Bernardo 等 (1992), Tang (1992), 与 Kurker 等 (1992) 提出了许多有效的方

法，并详细讨论了电算试验的设计和应用． Sacks 等 (1989) 的综合文章给这个方面提供了一个清楚的轮廓．

本节我们不打算全面介绍 DCE, 只打算讨论 LHS 和 NTM 的关联，这是因为 LHS 在 DCE 理论中起了重要作用．

有许多方式来叙述 LHS, LHS 的发明者 McKay, Beckman 与 Conover 给出的叙述如下：如果我们欲确保每个输入变量 X_k 在总输入的分布中有一定的比例；我们可将 X_k 的变化范围分成 n 个层，每层的边缘概率均为 $1/n$, 且每一层恰有一个样本．令这个样本为 $x_{kj}, j=1,\cdots,n$. 由 X_k, $k=1,\cdots,s$ 组成 $\boldsymbol{x}_i$, $i=1,\cdots,n$. X_k 的各个分量的位置，随机地决定．这样一个选择输入的方法是配额抽样的推广，也可视为拉丁方抽样的 s 维推广．

对 LHS 的比较数学化的叙述由 Stein (1987) 给出．设参数 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)'$ 相应随机向量的 c.d.f. 由 $F(\boldsymbol{x})$ 给出，这里

$$F(\boldsymbol{x}) = \prod_{k=1}^{s} F_k(x_k), \tag{5.6.2}$$

F_k 是 X_k 的 c.d.f., $k=1,\cdots,s$. 那么产生一个有 n 个点的拉丁超立方体抽样其步骤如下：

步骤 1 产生一个 $n\times s$ 的矩阵 $\boldsymbol{P}=(p_{jk})$, 它的列相互独立，每个列均为 $\{1,2,\cdots,n\}$ 的一个随机置换．

步骤 2 产生一个 $n\times s$ 矩阵 $\boldsymbol{U}=(u_{jk})$, 所有的 u_{jk} 独立同分布于 $U(0,1)$, 并独立于 $\boldsymbol{P}$.

步骤 3 令

$$x_{jk} = F_k^{-1}(n^{-1}(p_{jk}-1+u_{jk})), \tag{5.6.3}$$

则 $\{\boldsymbol{x}_j=(x_{j1},\cdots,x_{js})', j=1,\cdots,n\}$ 是 $F(\boldsymbol{x})$ 的一个大小为 n 的拉丁超立方体抽样．

例 5.6 令 $\boldsymbol{x}\sim U(C^s)$. 当 $s=2, n=6$ 时，图 5.5 给出了一个 LHS. 我们看到 $p_{j1},\cdots,p_{js}$ 决定 $\boldsymbol{x}_j$ 落于那个"方格", $u_{j1},\cdots,u_{js}$

决定 $\boldsymbol{x}_j$ 在方格中的位置. 注意, 在图 5.5 中每行每列恰有一个观测值.

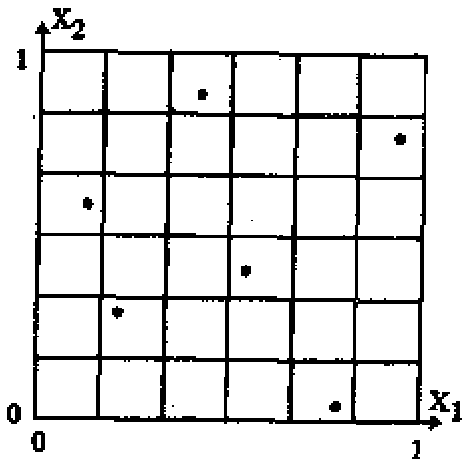


图 5.5　拉丁超立体抽样

我们现在来比较 (5.6.1) 定的 $\bar{h}$ 的方差, 一种情形是简单随机抽样, 另一种是 LHS. 若是简单随机抽样, 估计 $\bar{h}$ 是无偏的, 且

$$\operatorname{Var}(\bar{h}) = \operatorname{Var}(h(\boldsymbol{x}))/n. \tag{5.6.4}$$

若采用 LHS, $\bar{h}$ 仍旧是无偏的, 且

$$\operatorname{Var}(\bar{h}) = \operatorname{Var}(h(\boldsymbol{x}))/n + (n-1)\operatorname{Cov}(h(\boldsymbol{x}_1), h(\boldsymbol{x}_2))/n. \tag{5.6.5}$$

因此, LHS 能降低方差当且仅当协方差 $\operatorname{Cov}(h(x_1), h(x_2)) < 0$. McKay 等 (1979) 指出, 当 $h(\boldsymbol{x})$ 对每个变量是单调时, 协方差是负的. Iman 与 Conover (1980) 给出该协方差的各种精确表达式. Stein (1987) 指出, 在一个较弱的条件下, 当 $n \to \infty$ 时协方差渐近为非正数. 具体来讲, 令

$$g_k(x_k) = \int_{R^{s-1}} h(\boldsymbol{x}) \prod_{\substack{i=1 \\ i\neq k}} dF_i(x_i) \tag{5.6.6}$$

并且 $\{\boldsymbol{x}_{jn}\}, j = 1, 2, \cdots, n, n = 1, 2, \cdots$ 是一个无穷的随机向量的三角体系, 使得 $\{\boldsymbol{x}_{1n}, \cdots, \boldsymbol{x}_{nn}\}$ 是一个 LHS. Stein 证明了如下事实:

定理 5.2 若 $Eh^2 < \infty$, 则当 $n \to \infty$ 时,

$$\begin{aligned}&\mathrm{Cov}\,(h(\boldsymbol{x}_{1n}), h(\boldsymbol{x}_{2n}))\\&= sn^{-1}(Eh)^2 - n^{-1}\sum_{k=1}^{s}\int g_k(x)^2 dF_k(x) + o(n^{-1}).\end{aligned} \tag{5.6.7}$$

由 Jensen's 不等式有

$$\int g_k(x)^2 dF_k(x) \geq \left(\int g_k(x) dF_k(x)\right)^2 = (Eh)^2; \tag{5.6.8}$$

因此

$$\lim_{n\to\infty} n\,\mathrm{Cov}\,(h(\boldsymbol{x}_{1n}), h(\boldsymbol{x}_{2n})) \leq 0.$$

由定理 5.2 我们看到，对任何平方可积函数 $h(\boldsymbol{x})$, 在渐近意义下， LHS 至少不差于简单随机抽样. 我们可将定理 5.2 表达为一个更易解释的形式. 定义

$$h_a(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{s} g_k(\boldsymbol{x}_k) - (s-1)Eh \tag{5.6.9}$$

和

$$r(\boldsymbol{x}) = h(\boldsymbol{x}) - h_a(\boldsymbol{x}). \tag{5.6.10}$$

则函数 $h_a(\boldsymbol{x})$ 是拟合 $h(\boldsymbol{x})$ 的最好的可加项，即

$$\int r^2(\boldsymbol{x}) dF(\boldsymbol{x}) \leq \int \left[h(\boldsymbol{x}) - \sum_{k=1}^{s} h_k(x_k)\right]^2 dF(\boldsymbol{x}) \tag{5.6.11}$$

对任意的单变量函数 $h_1, \cdots, h_s$ 成立. 从而，当 $n \to \infty$ 时有

$$\mathrm{Var}\left(n^{-1}\sum_{j=1}^{n} h(\boldsymbol{x}_{jn})\right) = n^{-1}\int r(\boldsymbol{x})^2 dF(\boldsymbol{x}) + o(n^{-1}). \tag{5.6.12}$$

因此，利用 LHS 可以来过滤 $h(\boldsymbol{x})$ 的可加分量.

Tang (1992) 提出了一种所谓的 **U 抽样**, 并证明 U 抽样能改善 LHS; U 抽样能过滤所有的二阶交互作用和主效应, 而 LHS 只能过滤主效应. Stein (1987) 进一步指出, 若 $Eh(\boldsymbol{x})^4 < \infty$, 则当 $n \to \infty$ 时

$$\sqrt{n}\left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} h(\boldsymbol{x}_{jn}) - Eh(\boldsymbol{x})\right) \xrightarrow{\mathcal{L}} N\left(0, \int r(\boldsymbol{x})^2 dF(\boldsymbol{x})\right). \quad (5.6.13)$$

这里 $\xrightarrow{\mathcal{L}}$ 表示收敛是在分布收敛意义下. 可惜 Stein 的证明有错, Owen (1992a) 给予了更正, 但要假定 h 是有界的.

Owen (1992b) 建议用正交阵改进 LHS 的另一个方法, 我们将这一方法记为 OALHS. 他证明了 OALHS 比 LHS 改进之处为 OALHS 能过滤所有二阶交互作用与主效应, 从而可以降低 $\bar{h}$ 的方差. 为了比较, 对于 **简单随机抽样** (SRS), LHS 与 OALHS, 我们将 $\bar{h}$ 的方差列于下:

$$\begin{aligned}
&\text{SRS:} && \frac{1}{n}\operatorname{Var}(h(\boldsymbol{x}));\\
&\text{LHS:} && \frac{1}{n}\operatorname{Var}(h(\boldsymbol{x})) - \frac{c}{n} + o(n^{-1});\\
&\text{OALHS:} && \frac{1}{n}\operatorname{Var}(h(\boldsymbol{x})) - \frac{d}{n} + O(n^{-3/2}),
\end{aligned}$$

此处 c, d 为正常数, 我们可以看出所有这些方法中, 在 $\operatorname{Var}(\bar{h}) = O(n^{-1})$ 意义之下, $\bar{h}$ 收敛于 $E(h(\boldsymbol{x}))$ 的收敛速率都是一样的.

在 LHS 和 *glp* 集之间有着一定的关系, 在 LHS 中矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的每一列是 $\{1, 2, \cdots, n\}$ 的一个置换, 同样的性质适用于 *glp* 阵 (q_{kj}), 只是 $\boldsymbol{P}$ 的列随机产生, 而 (q_{jk}) 由同余乘产生. 在 (q_{kj}) 的列之间虽然不独立, 但渐近不相关. 在 LHS 中的试验点是将 $\boldsymbol{P}$ 用矩阵 $\boldsymbol{U}$ 作一个调整, $\boldsymbol{U}$ 为均匀分布变量组成的矩阵, 从而使得试验点有好的随机性质, 而 *glp* 集并未作这种调整, 故失去了随机性. Ylvisaker (1975) 指出在二维随机场的统计最优设计问题等价于寻找最优样本点作二维积分预报; 即求积公式的应

用. Stein (1987) 指出, $\bar{h}$ 收敛到 $E(h(\boldsymbol{x}))$ 的速度在概率意义下为 $O(n^{-1/2})$ ((5.6.13)), 它同于简单随机抽样技术的运用, 只是前者改进了后者极限分布的方差. LHS 和简单的随机抽样的极限分布方差分别为

$$\int r(\boldsymbol{x})^2\, dF(\boldsymbol{x}) \qquad \text{和} \qquad \int h(\boldsymbol{x})\, dF(\boldsymbol{x}).$$

因此, 从数值积分的观点, LHS 及其改进 OALHS 属于蒙特卡罗积分的方差缩小技术. 在第二章, 我们曾指出, 对有界变差函数的积分, 若用 *glp* 集, 其收敛速度可达 $O(n^{-1}\log^s n)$. 因此我们可以期望 NTM 在研究电算试验设计时, 将具有重要作用. 最近方开泰与朱力行 (1992) 提出了所谓的 **均匀随机设计** (uniformly random design). 记为 URD, 在此 $\mathrm{Var}(\bar{h}) = O(n^{-2}\log^{2s} n)$, 当 s 不很大时, 这结果大大改进了 LHS 与 OALHS 的相应结果. URD 的程序如下:

步骤 1 由给定的 n 和 s, 查到生成矢量 $\{n; h_1, \cdots, h_s\}$, 产生 *glp* 集 $\{\boldsymbol{a}_k,\ k = 1, \cdots, n\}$.

步骤 2 用蒙特卡罗方法生成 n 个 i.i.d. 随机矢量 $\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_n$, 其中每个均在 $(-1,1)^s$ 上均匀分布. 命

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{a}_k + \frac{\boldsymbol{u}_k}{2n}, \qquad k = 1, \cdots, n. \tag{5.6.14}$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k,\ k = 1, \cdots, n\}$ 就是欲求的 URD.

下面的结果表示, 一般说来, $\bar{h}$ 不是 $E(h(\boldsymbol{x}))$ 的无偏估计, 但却是渐近地无偏, 且有收敛速度 $O(n^{-1}\log^s n)$.

定理 5.3 假定 $h(\boldsymbol{x})$ 有有界偏微商,

$$\left| \frac{\partial^s h(\boldsymbol{x})}{\partial x_1 \cdots \partial x_s} \right| \le C, \tag{5.6.15}$$

且低次导数亦囿于 C. 命 N 为自然数的无穷子集及

$$\mathcal{P}_n = (\boldsymbol{a}_1^{(n)}, \cdots, \boldsymbol{a}_n^{(n)}), \qquad n \in N$$

为 R^s 的集合序列满足 $D(n,\mathcal{P}_n)=O(n^{-1}\log^s n)$ $(n\to\infty)$. 则估计

$$\bar{h}_n=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}h(\boldsymbol{x}_i^{(n)}) \tag{5.6.16}$$

渐近无偏，此处 $\{\boldsymbol{x}_i^{(n)},\ i=1,\cdots,n\}$ 为在基于 $\mathcal{P}_n$ 上的 URD 集合. 进而言之，我们有

$$\left|\bar{h}_n-E(h(\boldsymbol{x}))\right|=O(n^{-1}\log^s n), \tag{5.6.17}$$

$$\left|E\bar{h}_n-E(h(\boldsymbol{x}))\right|=O(n^{-1}\log^s n), \tag{5.6.18}$$

及

$$\left|\bar{h}_n-E\bar{h}_n\right|=O(n^{-1}\log^s n). \tag{5.6.19}$$

证　命 $F(\boldsymbol{x})$ 为 $U(C^s)$ 的 c.d.f;

$$h_n^*=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}h(\boldsymbol{a}_k^{(n)})$$

及

$$F_n(\boldsymbol{y})=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}I\left\{\boldsymbol{a}_k^{(n)}\le\boldsymbol{y}\right\},\qquad\forall\,\boldsymbol{y}\in R^s.$$

命 $v(h)$ 为在 Hardy 与 Krause 意义下 h 的全变差 (§2.1). 由条件 (5.6.15) 可知 $v(h)\le 2^sC$. 则

$$\begin{aligned}|h_n^*-E(h(\boldsymbol{x}))|&=\left|\int h(\boldsymbol{y})\,dF_n(\boldsymbol{y})-\int h(\boldsymbol{y})\,dF(\boldsymbol{y})\right|\\&\le v(h)\sup_{\boldsymbol{y}}|F_n(\boldsymbol{y})-F(\boldsymbol{y})|\\&\le 2^sC\sup_{\boldsymbol{y}}|F_n(\boldsymbol{y})-F(\boldsymbol{y})|\\&=O(n^{-1}\log^s n).\end{aligned}$$

另一方面，我们有

$$\begin{aligned}|\bar{h}_n - h_n^*| &\le \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\sup_{\boldsymbol{u}_k\in(-1,1)^s}\left|h(\boldsymbol{a}_k^{(n)}) - h(\boldsymbol{a}_k^{(n)}+\boldsymbol{u}_k/2n)\right| \\ &\le \max_{1\le k\le n}\sup_{\boldsymbol{u}_k\in(-1,1)^s}\left|h(\boldsymbol{a}_k^{(n)}) - h(\boldsymbol{a}_k^{(n)}+\boldsymbol{u}_k/2n)\right| \\ &\le sC/n.\end{aligned}$$

故得 (5.6.17). 从而 (5.6.18) 及 (5.6.19) 亦得证.

类似地，我们可以得到 $\mathrm{Var}\,(\bar{h}_n)$ 及 $\bar{h}_n$ 的均方差如下：

定理 5.4 在定理 5.3 相同假定之下，我们有

$$\mathrm{Var}\,(\bar{h}_n) = O(n^{-2}\log^{2s} n)$$

与

$$\mathrm{MSE}\,(h) = E(\bar{h}_n - E(h(\boldsymbol{x}))^2 = O(n^{-2}\log^{2s} n).$$

读者可以在方开泰与朱力行 (1993) 中找到更详细的讨论.

习题

5.1 用 *glp* 集产生两个均匀设计表 $U_{13}(13^{12})$ 和 $U_{15}(15^8)$.

5.2 证明

$$\int_0^1 \left(1 - \frac{2}{\pi}\ln(2\sin(\pi x))\right)dx = 1.$$

5.3 利用 MINITAB 中最优回归子集的程序到表 5.7 的数据，找出适合例 5.2 的回归模型并与 (5.3.6) 相比较.

5.4 证明 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{y}_a$ 的对称差有公式 (5.4.9). 你能对 $\boldsymbol{x}_a$ 和 $\boldsymbol{y}_b$ 给出类似的公式吗？

5.5 设有四个因子 A, B, C, D, 每个因子有四个水平 $A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, \cdots, D_4$. 利用 $L_{16}(4^5)$ (表 5.18) 给出试验方案.

表 5.20 $L_{16}(4^5)$

No	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	2	2	2	2
3	1	3	3	3	3
4	1	4	4	4	4
5	2	1	2	3	4
6	2	2	1	4	3
7	2	3	4	1	2
8	2	4	3	2	1
9	3	1	3	4	2
10	3	2	4	3	1
11	3	3	1	2	4
12	3	4	2	1	3
13	4	1	4	2	3
14	4	2	3	1	4
15	4	3	2	4	1
16	4	4	1	3	2

5.6 将练习 5.5 的试验点变换到 C^4 上，并求其偏差.

5.7 命 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})$ 为一个 $n\times s$ UD- 设计矩阵及 $\boldsymbol{X}$ 为它的诱导矩阵 (定义 5.1). 试回答下面问题：

(a) 试证 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{X}$ 的样本均值为 $\frac{n+1}{2}\mathbf{1}_n$ 与 $\frac{1}{2}\mathbf{1}_n$.

(b) 试证 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{X}$ 的每一列的样本方差为 $\frac{n(n+1)}{12}$ 与 $\frac{n+1}{12n}$.

(c) 命 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{n}\boldsymbol{X}'(\boldsymbol{I}_n-\frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n')\boldsymbol{X}$. 试证 $\mathrm{tr}\,(S)=\frac{s}{12}(1-\frac{1}{n^2})$.

5.8 给出 $\{3,4\}$ 单纯形格子点设计的试验点.

5.9 对四维情形给出单纯形重心设计的设计试验点.

5.10 当 $s=3$ 时，由 MSE 准则求出改进的轴设计和相应的 d.

5.11 对标准正态分布 $N_3(\mathbf{0},\boldsymbol{I}_3)$ 产生一个由 17 点组成的拉丁超立方体样本.

第六章　在统计推断中的一些应用

统计推断主要包括估计理论和假设检验. 本章我们将介绍 NTM 在统计推断中的一些应用，其中包括多元分布的参数极大似然估计，均值矢量的稳健估计、多元正态性检验和分布的球性检验. 在最后一节，我们提出一个算法用以在 Stiefel 流型上产生 NT-net, 它可以应用于投影寻踪法.

§ 6.1　极大似然估计

设总体分布为 $F(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}),\boldsymbol{x} \in R^p$, 分布参数 $\boldsymbol{\theta} \in \Theta \subset R^s$, 设 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ 是来自该总体的一个样本，通过样本我们要估计参数 $\boldsymbol{\theta}$ 或 $\boldsymbol{\theta}$ 的函数. 在 §3.3, 我们曾介绍如何用 SNTO 来求一元分布 $\boldsymbol{\theta}$ 的 MLE, 该方法也可应用到多元分布，这里我们仅以椭球分布为例.

设 $F(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})$ 是一个椭球分布，若它存在密度，则必有形式

$$g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}) = |\det \boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} h\big((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\big), \tag{6.1.1}$$

其中 $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}\},\boldsymbol{\mu} \in R^p,\boldsymbol{\Sigma}$ 是 $p \times p$ 矩阵， $\boldsymbol{\Sigma} > 0$ (§2.2). 不失一般性，我们可以假定 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是分布的协差阵 (方开泰， Kotz 与吴启宏 (1990) §2.5). 令 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ 为来自分布 (6.1.1) 的一个样本，其似然函数为

$$L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = |\det \boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{N}{2}} \prod_{i=1}^{N} h\big((\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})\big). \tag{6.1.2}$$

极大似然估计 $\widehat{\boldsymbol{\mu}},\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 使 $L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 达极大，或使对数似然函数

$$l(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = -\frac{N}{2}\log|\det\boldsymbol{\Sigma}| + \sum_{i=1}^{N}\log(h((\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu}))). \quad (6.1.3)$$

达极大. 一般来讲 $\widehat{\mu}$ 和 $\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 没有解析解，只有少数情况有解析解，例如，$h()$ 为指数函数，相应于正态总体. 因此，我们需要用数值方法求它们的近似值.

设 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为正定阵，它只有 $p(p+1)/2$ 个独立元，因此直接对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 求 $l(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的极大值并不方便. 于是我们推荐用 **Cholesky 分解**

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{L}'\boldsymbol{L},$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是 Cholesky 根，是一个上三角阵，其对角元素为正. 我们已知 $\boldsymbol{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 之间是一一对应的，$\boldsymbol{L}$ 的独立元个数也是 $p(p+1)/2$. 因此，我们可将 $L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 表示为 $L_*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{L})$, 从而 $\max_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}} L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \max_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{L}} L_*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{L})$. 类似地，$l(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 用 $l_*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{L})$ 来代替. 利用 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的矩估计

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{x}} &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{x}_i \\ \boldsymbol{S} &= \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{\boldsymbol{x}})(x_i-\bar{\boldsymbol{x}})' \equiv \boldsymbol{L}_1'\boldsymbol{L}_1, \end{aligned} \quad (6.1.4)$$

我们可以确定一个初始区域，以便使用 SNTO (§3.3) 求 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 MLE. 为此，我们提出下面的算法来求 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 MLE 的近似值.

第 1 步　由 (6.1.4) 计算样本均值 $\bar{\boldsymbol{x}} = (\bar{x}_1,\cdots,\bar{x}_p)'$ 和样本协差阵 $\boldsymbol{S}$.

第 2 步　求 $\boldsymbol{S}$ 的 Cholesky 根 $\boldsymbol{L}_1$, 即

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{L}_1'\boldsymbol{L}_1,$$

此处 $\boldsymbol{L}_1 = (l_{ij})$ 为上三角阵，其对角线元素为正.

第 3 步　置 $\boldsymbol{v}^{(0)} = (\bar{x}_1, \cdots, \bar{x}_p, l_{11}, \cdots, l_{1p}, l_{22}, \cdots, l_{2p}, \cdots, l_{pp})'$ 根据在 (6.1.1) 中 h 的性质. 取一个正向量 $\boldsymbol{c} \in R^{(p+3)p/2}$, 然后决定一个初始区域 $D^{(0)} = [\boldsymbol{v}^{(0)} - \boldsymbol{c}, \boldsymbol{v}^{(0)} + \boldsymbol{c}]$.

第 4 步　利用 SNTO 在 $D^{(0)}$ 上求 $l_*(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{L})$ 或 $L_*(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{L})$ 的近似极大值 M^* 和相应的极大值点 $\boldsymbol{v}^* = (v_1^*, \cdots, v_{p(p+3)/2}^*)'$. 则 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 MLE 可以从 $\boldsymbol{v}^*$ 用如下方式获得：$\widehat{\boldsymbol{\mu}} \approx \widehat{\boldsymbol{\mu}}^*$ 由 $\boldsymbol{v}^*$ 的前 p 个分量组成，由 $\boldsymbol{v}^*$ 的其余元素组成一个上三角阵 $\boldsymbol{L}^*$, 组成的方式是通过 $\boldsymbol{v}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{L}_1$ 之间的同样对应关系. 则

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}^* = (\boldsymbol{L}^*)'\boldsymbol{L}^*$$

是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的近似极大似然估计.

例 6.1　由统计模型，我们在多元 t 分布 $Mt_3(5, M_1, \boldsymbol{\Sigma})$ 中生成一个大小为 500 的样本 $\{\boldsymbol{x}_i\}$, 此处

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{0} \quad 及 \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.5 & 0.3 \\ 0.5 & 1.0 & 0.2 \\ 0.3 & 0.2 & 1.0 \end{pmatrix}.$$

似然函数为

$$L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = C|\det \boldsymbol{\Sigma}|^{-250} \prod_{i=1}^{500} \left(1 + \frac{1}{5}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})\right)^{-4},$$

其中 C 是正则化常数，删去常数 C 后，似然函数的对数函数为

$$l(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = -250|\det \boldsymbol{\Sigma}| - 4\sum_{i=1}^{500} \left(1 + \frac{1}{5}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})\right)$$

样本均值矢量与样本协差阵为

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} -0.0661 \\ 0.0626 \\ -0.0083 \end{pmatrix} \quad 及 \quad \boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} 1.7162 & 0.8318 & 0.4567 \\ 0.8318 & 1.5923 & 0.2680 \\ 0.4567 & 0.2680 & 1.6053 \end{pmatrix},$$

对应的 $-l(\bar{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{S})$ 之值为 1042.1. 在 SNTO 中取 $n_1=159,053, n_2=100,063$ 及 $\boldsymbol{c}=(1,\cdots,1)'$, 运用上述程序，我们求得 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 MSE 如下：

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix}-0.0926\\0.0765\\-0.0324\end{pmatrix}\quad 及\quad \widehat{\Sigma}=\begin{pmatrix}1.1681 & 0.5712 & 0.3451\\0.5712 & 1.0356 & 0.2411\\0.3451 & 0.2411 & 1.0042\end{pmatrix}.$$

这时 $-l(\widehat{\boldsymbol{\mu}},\widehat{\boldsymbol{\Sigma}})=1040.4<1042.1=-l(\bar{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{S})$. 由 SNTO 得到的结果与其他方法得到的结果是符合的.

现在我们来考虑 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的假设检验. 命 Ω 表示参数空间 $(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 并考虑假设

$$\begin{aligned}&\mathrm{H}_0: && (\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})\in\omega\subset\Omega,\\&\mathrm{H}_1: && (\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})\in\Omega/\omega,\end{aligned}\tag{6.1.5}$$

则假设 H_0 的似然比准则为

$$\lambda=\frac{\max_\omega L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})}{\max_\Omega L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})}\tag{6.1.6}$$

其中 $L((\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}))$ 是似然函数 (6.1.2). 分子和分母可分别用 SNTO 求得，然后 λ 的值可以和检验的渐近临界值比较.

若总体的分布不属于椭球等高分布类，我们可以用类似的方法求得极大似然估计和似然比统计量.

§ 6.2 均值矢量的稳健估计

所谓的参数稳健估计，是当总体分布有扰动时，它具有估计的稳定性. 例如，设 $X_1,\cdots,X_N$ 是来自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的一个样本. 那么 μ 的通常估计是由样本均值

$$\overline{X}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n}X_i.$$

给出，它不是稳健估计，因为如果某一观测值有大的偏差，则也导致 $\overline{X}$ 有大的偏差．令 $X_{(1)} \le X_{(2)} \le \cdots \le X_{(N)}$ 是样本的顺序统计量．**截尾估计**

$$\overline{X}_{(k)} = \frac{1}{N-2k} \sum_{i=k+1}^{N-k} X_{(i)}$$

$(k = 1, 2, \cdots, k < N/10)$ 是 μ 的一个无偏估计，它不受样本中极值影响，具有好的性质，因此 $\overline{X}_{(k)}$ 是一个稳健估计．我们也可用样本中位数

$$X_M = \begin{cases} X_{(\frac{(N+1)}{2})}, & \text{当 } N \text{ 为奇数,} \\ \left(X_{(\frac{N}{2})} + X_{(\frac{N}{2}+1)}\right)/2, & \text{其他情形,} \end{cases}$$

作为 μ 的稳健估计．

一元情形的稳健估计已为许多作者所研究，如 Tukey (1960), Huber (1964, 1972, 1973), 和 Andrews 等 (1972). α- 截尾均值和中位数是位置参数最流行的稳健估计，其思想可以用不同的方式推广到多元情形．例如 Bickel (1964), Gentleman (1965), Gnanadesikan (1977) Hampel 等 (1986) 及 Rousseeuw 与 Leroy (1987). 我们在此介绍 Rousseeuw 与 Zomeren (1990) 推荐的一个著名方法．这一方法称为 **椭球最小体积估计法** (MVE). 命 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 为取自一个 s 维总体的样本．我们欲用一个列矢量 $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ 及一个 $s \times s$ 方阵 $\boldsymbol{V}$ 来估计它的“中心”与“散度” (Scatter). MVE 定义为一对 $(\widehat{\boldsymbol{\mu}}, \boldsymbol{V})$ 使得 $\boldsymbol{V}$ 的行列式在下面条件下达到极小：

$$\#\{i : (\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}})' \boldsymbol{V}^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}}) \le a^2\} \ge h,$$

此处 $h = [(N + s + 1)/2]$, 其中 $[x]$ 表示 x 的整数部分．当我们希望数据的大部分来自正态分布时，固定常数 a^2 可以取作 $\chi^2_{s,50}$. 关于 MVE 的 **稳健距离** 定义为

$$RD_i = [(\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}})' \boldsymbol{V}^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}})]^{1/2} \tag{6.2.1}$$

然后我们可以计算一个加权平均

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \left(\sum_{i=1}^{N} w_i\right)^{-1} \sum_{i=1}^{N} w_i \boldsymbol{x}_i \tag{6.2.2}$$

及一个 **加权协差阵**

$$\boldsymbol{V}_1 = \left(\sum_{i=1}^{N} w_i - 1\right)^{-1} \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}}_1)(\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}}_1)'. \tag{6.2.3}$$

此处加权 $w_i = w_i(RD_i)$ 依赖于稳健距离.

关于 MVE, 有两个渐近程序, 一个是 Gasko 与 Donoho (1982) 程序的变体, 称之为 **投影程序**. 对于每个 $\boldsymbol{x}_i$, 考虑

$$u_i = \max_{\boldsymbol{a} \in U_s} |\boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{a} - L(\boldsymbol{x}_1'\boldsymbol{a}, \cdots, \boldsymbol{x}_N'\boldsymbol{a})| / S(\boldsymbol{x}_1'\boldsymbol{a}, \cdots, \boldsymbol{x}_N'\boldsymbol{a}) \tag{6.2.4}$$

其中 L 与 S 为一维 MVE 估计, 它们的计算方法如下. 对于任一组数 $z_1 \le z_2 \le \cdots \le z_N$, 取距离 $z_h - z_1, z_{h+1} - z_2, \cdots, z_N - z_{N-h+1}$ 的最小者, 用以确定这组数最短半数. 如果 $z_j - z_{j-h+1}$ 最小, 则置 L 为 z_j 与 z_{j-h+1} 之中点, 即 $L(z_1, \cdots, z_N) = (z_j + z_{j-h+1})/2$. 置 S 为这两点之长度 $S(z_1, \cdots, z_N) = c(N)(z_j - z_{j-h+1})$, 其中 $c(N)$ 是修正常数, 它依赖于样本之大小. 注意 (6.2.4) 就是 (6.2.1) 中 RD_i 的一维形式. 过去很难对于所有方向 $\boldsymbol{a}$ 来计算 u_i, 往往建议取 $\boldsymbol{a}$ 为形式 $\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{m}$, $i = 1, \cdots, N, \boldsymbol{m} = \left(\underset{1 \le j \le N}{\text{中点}}\, x_{j1}, \cdots, \underset{1 \le j \le N}{\text{中点}}\, x_{js}\right)'$. 显然仅仅取这些方向是不够的, 而用 U_s 上的一个 NT-net, 我们就可以用 NTM 来计算 u_i.

进而言之, 投影与 α- 截尾均值还可以启发用球上的 NT-net 得到一个新的位置的稳健估计. 对于 $\boldsymbol{\varepsilon}$-污染模型, 我们给出一些例子.

考虑如下的 ε- 污染模型

$$(1-\varepsilon)N_p(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma})+\varepsilon N_p(\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma}),\qquad \boldsymbol{\mu}_1\neq k\boldsymbol{\mu}_2, \tag{6.2.5}$$

这里 ε 是一个小的正数. 设由总体 (6.2.5) 中抽出一个样本 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$, 这表明在样本中有些观测值被污染了. 我们要估计原来的均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1$. 对任意 $\boldsymbol{c}\in U_p$ 令 $f_i(\boldsymbol{c})=\boldsymbol{c}'\boldsymbol{x}_i/\|\boldsymbol{c}'\boldsymbol{x}_i\|$, $i=1,\cdots,N$. $f_i(\boldsymbol{c})$ 在方向 $\boldsymbol{\mu}_1/\|\boldsymbol{\mu}_1\|$ 达到其极大值的机会比其它任何方向要多, 记住这个事实, 我们提出如下的办法.

令 $\{\boldsymbol{c}_k, k=1,\cdots,n\}$ 是 U_p 上的一个 NT-net. 置 $e_{ki}=f_i(\boldsymbol{c}_k), i=1,\cdots,N,\ k=1,\cdots,n$. 然后对每个 k 将 $\{e_{ki}\}$ 排序

$$e_{k(k_1)}\leq e_{k(k_2)}\leq\cdots\leq e_{k(k_N)},\qquad k=1,\cdots,n. \tag{6.2.6}$$

去掉前 $n_1=[N\varepsilon]$ 小的顺序统计量, 将剩下的求和

$$e_k=\sum_{j=n_1+1}^{N}e_{k(k_j)},\qquad k=1,\cdots,n.$$

我们建议 $\boldsymbol{\mu}_1$ 用下面的估计

$$\bar{x}_T=\frac{1}{N-n_1}\sum_{j=n_1+1}^{N}x_{k_0(k_{0j})},$$

其中 k_0 满足 $e_{k_0\cdot}=\max_k e_{k\cdot}$.

这个估计方法由方开泰, 袁克海与 Bentler (1992) 所建议, 是类似于一元情形的 α 截尾均值, 并含有极大似然的思想. 显然, 这个方法也能用于其他多元连续分布的位置参数估计. 在下面的例子中, 读者将会看到上述方法的确改进了通常的估计 $\bar{\boldsymbol{x}}$.

例 6.2 用统计模拟方法由模型 (6.2.5) 中获得一个大小为 30 的样本如下, 其中 $\varepsilon=0.1,\boldsymbol{\mu}_1=(-1.584,7.350)',\boldsymbol{\mu}_2=(4.496,1.509)'$.

X_1	X_2	X_1	X_2	X_1	X_2
−1.901	6.358	−3.474	8.331	−3.394	7.867
−0.114	7.783	−1.116	6.246	−2.605	6.056
−0.685	6.058	−1.666	7.237	−2.601	9.775
−1.283	7.748	−0.057	6.966	−2.179	7.016
−1.315	7.697	−0.910	6.954	−2.655	7.506
0.141	6.220	0.391	8.110	−1.571	7.043
−0.702	7.930	−1.640	6.108	−2.446	6.348
−0.169	7.087	−0.998	7.053	4.123	1.254
−1.466	5.547	−0.563	6.639	4.675	0.168
−1.256	6.684	−1.875	5.828	3.598	1.900

通常的样本均值为

$$\bar{\boldsymbol{x}} = (-0.877,\ 6.451)',$$

利用 180 个投影方向，新的估计为

$$\bar{\boldsymbol{x}}_T = (-1.434,\ 7.045)'$$

注意距离 $d(\boldsymbol{\mu}_1, \bar{\boldsymbol{x}}) = 1.309, d((\boldsymbol{\mu}_1, \bar{\boldsymbol{x}}_T) = 0.116$. 后者优于通常的估计 $\bar{\boldsymbol{x}}$.

为了确认结论的可靠性，我们让 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 从一个正态总体中随机地产生，并重复上面的过程 20 次，相应的 $D_0 = d(\boldsymbol{\mu}_1, \bar{\boldsymbol{x}})$ 和 $D_1 = d(\boldsymbol{\mu}_1, \bar{\boldsymbol{x}}_T)$ 列于表 6.1. 结果表明在大多数情形下 D_0 比 D_1 大得多.

应用这个方法到样本大小为 40 和 50 的情形，我们获得相同的结论. 在表 6.1 的最后一列列出了 $D = d(\boldsymbol{\mu}_1/\|\boldsymbol{\mu}_1\|, \boldsymbol{\mu}_2/\|\boldsymbol{\mu}_2\|)$ 的值. 模拟结果还指出，当 D 较小时 D_0 和 D_1 彼此接近. 因此当 D 较大时，该法特别有效，例如 $\boldsymbol{\mu}_1 \perp \boldsymbol{\mu}_2$，即 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 互相正交时该法十分有效.

表 6.1 D_0, D_1 和 D

D_0	D_1	D
0.101	0.063	0.078
1.477	0.007	2.757
0.853	0.227	2.771
0.693	0.072	1.087
0.693	0.015	1.835
3.901	0.034	3.328
0.497	0.278	0.007
1.901	0.014	3.143
0.047	0.016	0.032
1.930	0.147	3.145
0.128	0.058	3.062
0.331	0.002	2.906
1.469	0.051	3.998
0.247	0.003	0.815
0.170	0.104	0.514
0.534	0.072	3.241
0.308	0.288	0.583
0.255	0.043	0.460
1.431	2.001	0.009
1.389	0.000	3.993

§ 6.3 多元正态性检验 (I)

在过去的几十年中，检验多元正态性已受到极大关注，例如 Mardia(1970, 1971, 1974, 1975), Malkovich 与 Afifi (1973), Hensler, Mehrotra 与 Michalek (1977), Cox 与 Small (1978), Gnanadesikan (1977), Bera 与 John (1983), Baringhaus 与 Henze (1988), Csörgö (1989) 及 Horswell 与 Looney (1992), 形成了大量文献. 但迄今为止没有一个方法能为大多数人所接受. 最近受 Malkovich 与 Afifi (1973) 及 Machado (1983) 的影响, 方开泰, 袁克海与 Bentler (1992)

利用了 **交并原则** 和数论方法提出了另一方法. 众所周知, 一个 p 维随机矢量 $\boldsymbol{x}$ 遵从多元正态分布当且仅当对每个 $\boldsymbol{c} \in R^p, \boldsymbol{c}'\boldsymbol{x}$ 遵从一元正态分布. 不失一般性, 可以假定 $\|\boldsymbol{c}\| = 1$ 即 $\boldsymbol{c} \in U_p$. 若我们能找到一个 "最坏的" 投影方向 $\boldsymbol{c}_0$, 则检验多元正态性就等价于检验 $\boldsymbol{c}_0'\boldsymbol{x}$ 的一元正态性. 设 $\{\boldsymbol{c}_k, k = 1, \cdots, n\}$ 是 U_p 上的一个 NT-net, 则 $\{\boldsymbol{c}_k\}$ 中的最坏方向 $\boldsymbol{c}^*$ 应当接近于 $\boldsymbol{c}_0$. 因此检验多元正态性就近似于等价检验 $\boldsymbol{c}^{*\prime}\boldsymbol{x}$ 的一元正态性, 即

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}_0: \quad \boldsymbol{x} \text{ 遵从多元正态分布} \\ &\mathrm{H}_1: \quad \boldsymbol{x} \text{ 遵从非多元正态分布} \end{aligned} \tag{6.3.1}$$

$\Longleftrightarrow$

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}_0: \quad \boldsymbol{c} \in U_p, \ \boldsymbol{c}'\boldsymbol{x} \text{ 遵从正态分布} \\ &\mathrm{H}_1: \quad \text{对某 } \boldsymbol{c} \in U_p, \boldsymbol{c}'\boldsymbol{x} \text{ 遵从非正态分布} \end{aligned} \tag{6.3.2}$$

$\Longleftarrow\approx\Longrightarrow$ (近似等价)

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}_0: \quad \boldsymbol{c}_k'\boldsymbol{x} \text{ 遵从正态分布 } 1 \le k \le n, \\ &\mathrm{H}_1: \quad \text{对某 } k, \ \boldsymbol{c}_k'\boldsymbol{x} \text{ 遵从非正态分布} \end{aligned} \tag{6.3.3}$$

$\Longleftrightarrow$

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}_0: \quad \boldsymbol{c}^{*\prime}\boldsymbol{x} \text{ 遵从正态分布} \\ &\mathrm{H}_1: \quad \boldsymbol{c}^{*\prime}\boldsymbol{x} \text{ 遵从非正态分布} \end{aligned}$$

有许多方法可以检验一元正态性, 利用 **样本偏态** 和 **峰态** 来检验正态性是流行的方法之一, 尽管它不是最好的方法. 令 $X_1, \cdots, X_N$ 是一个样本, 则样本偏态和峰态定义为

$$\begin{aligned} Sk &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(X_i - \overline{X})^3 \Bigg/ \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(X_i - \overline{X})^2\right]^{3/2} \\ &= \sqrt{N}\sum_{i=1}^{N}(X_i - \overline{X})^3 \Bigg/ \left[\sum_{i=1}^{N}(X_i - \overline{X})^2\right]^{3/2} \end{aligned}$$

和

$$Ku=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(X_i-\overline{X})^4\Big/\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(X_i-\overline{X})^2\right]^2-3$$
$$=N\sum_{i=1}^{N}(X_i-\overline{X})^4\Big/\left[\sum_{i=1}^{N}(X_i-\overline{X})^2\right]^2-3,$$

其中 $\overline{X}$ 是样本均值. 其临界值可以在 Pearson 与 Hartley (1956) 的著作中找到.

令 $Sk(\boldsymbol{b})$ 和 $Ku(\boldsymbol{b})$ 分别是 $\{\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}_i, i=1,\cdots,N\}$ 的样本偏态和样本峰态, 即

$$Sk(\boldsymbol{b})=\frac{\sqrt{N}\sum\limits_{j=1}^{N}(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{b}'\bar{\boldsymbol{x}})^3}{\left[\sum\limits_{j=1}^{N}(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{b}'\bar{\boldsymbol{x}})^2\right]^{3/2}}, \tag{6.3.4}$$

和

$$Ku(\boldsymbol{b})=\frac{N\sum\limits_{j=1}^{N}(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{b}'\bar{\boldsymbol{x}})^4}{\left[\sum\limits_{j=1}^{N}(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{b}'\bar{\boldsymbol{x}})^2\right]^{2}}-3, \tag{6.3.5}$$

其中 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 为样本均值. 最坏的方向 $\boldsymbol{b}_0$ 可以视为

$$Sk(\boldsymbol{b}_0)=\max_{\boldsymbol{b}\in U_p}|Sk(\boldsymbol{b})|\cong\max_k|Sk(\boldsymbol{b}_k)|$$

或

$$Ku(\boldsymbol{b}_0)=\max_{\boldsymbol{b}\in U_p}|Ku(\boldsymbol{b})|\cong\max_k|Ku(\boldsymbol{b}_k)|.$$

令 $\{\boldsymbol{b}_k, k=1,\cdots,n\}$ 是 U_s 上的一个 NT-net, 因此, 当 n 大时统计量

$$\begin{aligned}Sk_{\max}&=\max_k|Sk(\boldsymbol{b}_k)|\\Ku_{\max}&=\max_k|Ku(\boldsymbol{b}_k)|\end{aligned} \tag{6.3.6}$$

分别接近于 $Sk(\boldsymbol{b}_0)$ 和 $Ku(\boldsymbol{b}_0)$, 从而可以用于检验多元正态性. 给定显著性水平 α, 拒绝区域为

$$Sk_{\max} > Sk(\alpha) \quad \text{或} \quad Ku_{\max} > Ku(\alpha).$$

对 $p = 2, 3, 4, 5$ 和各种不同的样本大小, 表 6.2 和 6.3 给出了 $\alpha = 1\%$ 和 $\alpha = 5\%$ 的 $Sk(\alpha)$ 和 $Ku(\alpha)$ 的临界值表, 计算是用随机模拟, 样本大小为 2000 时的结果 (方开泰, 袁克海与 Bentler (1992)).

下面的例子有助于说明使用上面的方法.

例 6.3 该例来自于中国 1976 年制定男人服装标准的问题, 数据为测量人体 (cm) 的 12 个部位:

X_1: 上身长	X_2: 胳膊长	X_3: 胸围	X_4: 颈围
X_5: 总肩宽	X_6: 前胸宽	X_7: 后背宽	X_8: 身高
X_9: 颈下高	X_{10}: 下身长	X_{11}: 腰围	X_{12}: 臀围.

为了说明方法的使用, 这里仅仅取了部分数据, 给出一个大小为 100 的样本 (方开泰, 袁克海与 Bentler (1992)). 每个度量的样本边缘偏态和峰态列于表 6.4, 结果表明, 除 X_{11} 以外每个部位的大小均可认为来自一个正态分布. 如果我们的兴趣在于检验部分部位度量的多元正态性, 例如, 检验 $\boldsymbol{x} = (X_1, X_3, X_8, X_{10}, x_{12})'$ 的多元正态性, 用 $\{\boldsymbol{x}_i, i = 1, \cdots, 100\}$ 表示相应的观测值, 并执行如下步骤:

第 1 步 选择投影方向数 $n = 932$. 这里我们用生成矢量 $\{932; 1, 116, 288, 314\}$ 在 U_5 上产生 932 个方向 $\boldsymbol{c}_k$ 组成 glp 集.

第 2 步 计算 $\{\boldsymbol{c}_k'\boldsymbol{x}_i, i = 1, \cdots, 100\}, k = 1, \cdots, 932$, 共 932 对样本偏态和样本峰态, 并分别求它们绝对值的极大值

$$Sk_{\max} = 0.7293, \qquad Ku_{\max} = 1.0911.$$

因为 $Sk_{\max}$ 和 $Ku_{\max}$ 均分别小于表 6.2 和表 6.3 中的 5% 的临界值, 故我们可以认为 $\boldsymbol{x} = (X_1, X_3, X_8, X_{10}, X_{12})'$ 遵从多元正态分布.

表 6.2 $Sk_{\max}$ 的均值、标准差和临界值 $P(Sk_{\max} > Sk(\alpha)) = \alpha$

样本大小	5%	1%	均值	标准差
				$p=2$
30	1.136	1.450	0.630	0.273
40	1.022	1.307	0.570	0.245
50	0.924	1.181	0.519	0.220
60	0.842	1.074	0.475	0.200
70	0.776	0.985	0.440	0.183
80	0.727	0.915	0.412	0.171
90	0.693	0.863	0.393	0.163
100	0.676	0.829	0.382	0.158
				$p=3$
30	1.407	1.717	0.883	0.279
40	1.266	1.540	0.798	0.249
50	1.142	1.387	0.724	0.223
60	1.037	1.258	0.662	0.201
70	0.949	1.152	0.610	0.183
80	0.880	1.071	0.570	0.170
90	0.829	1.013	0.541	0.160
100	0.796	0.979	0.523	0.155
				$p=4$
40	1.428	1.702	0.960	0.246
50	1.303	1.550	0.882	0.223
60	1.191	1.416	0.813	0.203
70	1.094	1.299	0.752	0.185
80	1.011	1.199	0.701	0.170
90	0.943	1.117	0.658	0.157
100	0.888	1.053	0.623	0.147
110	0.848	1.005	0.598	0.139
120	0.822	0.975	0.581	0.134
				$p=5$
40	1.540	1.843	1.097	0.245
50	1.407	1.675	1.005	0.221
60	1.288	1.527	0.921	0.200
70	1.185	1.398	0.853	0.181
80	1.098	1.288	0.793	0.166
90	1.025	1.197	0.743	0.153
100	0.968	1.126	0.703	0.143
110	0.926	1.074	0.674	0.137
120	0.899	1.042	0.655	0.133

表 6.3 Ku_{max} 的均值、标准差和临界值 $P(Ku_{max} > Ku(\alpha)) = \alpha$

样本大小	5%	1%	均值	标准差
				$p=2$
30	2.281	3.684	1.150	0.597
40	2.096	3.371	1.058	0.549
50	1.932	3.081	0.977	0.505
60	1.788	2.816	0.907	0.466
70	1.663	2.574	0.848	0.431
80	1.559	2.357	0.801	0.400
90	1.475	2.163	0.764	0.373
100	1.411	1.993	0.739	0.351
				$p=3$
30	3.342	4.759	1.650	0.827
40	3.051	4.354	1.523	0.743
50	2.794	3.991	1.410	0.671
60	2.571	3.671	1.313	0.610
70	2.384	3.394	1.231	0.561
80	2.231	3.159	1.164	0.524
90	2.113	2.967	1.112	0.498
100	2.029	2.819	1.076	0.484
				$p=4$
40	3.901	5.455	1.995	0.943
50	3.582	4.996	1.855	0.861
60	3.295	4.586	1.729	0.787
70	3.039	4.227	1.617	0.722
80	2.816	3.919	1.520	0.666
90	2.624	3.661	1.438	0.619
100	2.465	3.453	1.369	0.580
110	2.337	3.296	1.316	0.550
120	2.241	3.189	1.277	0.528
				$p=5$
40	4.491	6.183	2.479	1.059
50	4.166	5.678	2.296	0.973
60	3.866	5.224	2.132	0.894
70	3.591	4.821	1.984	0.823
80	3.342	4.468	1.855	0.758
90	3.118	4.165	1.743	0.701
100	2.919	3.913	1.649	0.651
110	2.745	3.712	1.572	0.608
120	2.598	3.561	1.513	0.572

表 6.4 样本偏态和样本峰态

部位表	偏态	峰态
X_1	−0.13959	−0.18798
X_2	0.36731	0.09630
X_3	0.47527	0.10808
X_4	0.37394	−0.26673
X_5	0.30296	−0.52081
X_6	0.25955	0.15814
X_7	0.38965	0.80882
X_8	0.03461	−0.45418
X_9	0.03273	−0.54070
X_{10}	0.00703	−0.52704
X_{11}	0.67409	0.10105
X_{12}	0.47567	−0.31017

下面的数值结果表明，前面三个子集均遵从多元正态，而最后两个则为非正态的.

$$\{X_1,X_3,X_8,X_{10}\}:\ Sk_{\max}=0.6913,\ Ku_{\max}=0.9395,$$
$$\{X_1,X_8,X_{10},X_{12}\}:Sk_{\max}=0.7042,\ Ku_{\max}=0.7886,$$
$$\{X_3,X_8,X_{10},X_{12}\}:Sk_{\max}=0.7411,\ Ku_{\max}=0.8843,$$
$$\{X_4,X_5,X_6,X_{11}\}:\ Sk_{\max}=0.7776,\ Ku_{\max}=1.484,$$
$$\{X_2,X_4,X_6,X_{11}\}:\ Sk_{\max}=0.2798,\ Ku_{\max}=1.6158$$

例 6.4 令 $\boldsymbol{x}=(X_1,X_2,X_3,X_4)'$ 有独立的分量，其中 $X_i\sim N(0,1)$, $i=1,2,3$, $\log X_4\sim N(0,1)$, 即 X_4 有标准对数正态分布. 利用标准的模拟技术产生 10 组样本大小为 80 的样本，它们的 $Sk_{\max}$ 和 $Ku_{\max}$ 列于表 6.5. 表中左一半只考虑 $\boldsymbol{X}$ 的前三个变量，其 $Sk_{\max}$ 和 $Ku_{\max}$ 的计算依赖于 377 个投影方向；表的右半部是考虑全部四个变量，并用了 597 个投影方向. 表 6.5 的结果表明，关于 (X_1,X_2,X_3) 的正态性检验总是被接受，而关于 (X_1,X_2,X_3,X_4) 的正态性检验总是被拒绝.

表 6.5 正性检验

ssizep =3			p=4		
Sk_{max}	Ku_{max}	结论	Sk_{max}	Ku_{max}	结论
0.4429	0.6930	A	6.020	41.391	R
0.6938	0.8305	A	4.992	30.364	R
0.4736	0.8955	A	2.411	7.391	R
0.4943	0.9091	A	1.895	3.234	R
0.5875	0.9139	A	1.638	3.754	R
0.8823	1.1531	A	2.188	5.137	R
0.3676	0.8682	A	1.066	0.967	R
0.6105	1.0520	A	1.786	2.805	R
0.1775	0.7545	A	2.635	8.292	R
0.2989	1.0035	A	2.387	6.885	R

A：接受 R：拒绝

将多元检验化为一元检验的方法，在经典的多元分析中称为交并原则 (the union-intersection principle). 近年来，这个思想发展为多元分析中的活跃方向投影寻踪法 (the projection pursuit method, 或 PP method) (Huber (1985)). 在 §6.6, 我们将详细说明.

李国英和查文星 (1991), 利用一元的 Neyman 分布拟合检验 (Neyman (1937)) 和 PP 方法作多元分布拟合检验. 设 $Y_1, \cdots, Y_N$ 是来自一个总体的样本，其总体分布 G 未知，我们欲检验

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{H}_0: \quad G = F, \\
&\mathrm{H}_1: \quad G \neq F,
\end{aligned}
\tag{6.3.7}
$$

其中 $F(x)$ 是一已知分布函数. Neyman 建议用统计量

$$K_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{m}\left[\sum_{j=1}^{N}\pi_i(F(Y_j))\right]^2 \tag{6.3.8}$$

来检验假设 (6.3.7), 其中 $\pi_0 \equiv 1, \pi_1, \cdots, \pi_m$ 是 (0, 1) 上的一组正交多项式, 即

$$\int_0^1 \pi_i(y)\pi_j(y)\,dy = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

K_N((6.3.8)) 称为 **Neyman 统计量**. 可以证明, 若零假设成立, 则当 $N \to \infty$ 时, K_N 的极限分布是 m 个自由度的卡方分布 χ^2_m.

今设 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 为来自一个总体分布 $G(\boldsymbol{x})$ 未知的样本, 我们要检验

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}_0: \quad G = F, \\ &\mathrm{H}_1: \quad G \neq F, \end{aligned} \tag{6.3.9}$$

其中 $F(\boldsymbol{x})$ 是一个已知多元连续分布函数. 令

$$F_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}) \quad 及 \quad G_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = G(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}), \qquad \forall\, \boldsymbol{a} \in U_s.$$

则 Neyman 统计量能够用于零假设

$$H_0^{\boldsymbol{a}}: \ G_{\boldsymbol{a}} = F_{\boldsymbol{a}},$$

其相应的 Neyman 统计量为

$$K_N^{\boldsymbol{a}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{m}\left[\sum_{j=1}^{N}\pi_i(F_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}_j))\right]^2.$$

用 PP 思想作 (6.3.9) 的检验统计量是

$$K_N = \sup_{\|\boldsymbol{a}\|=1} K_N^{\boldsymbol{a}},$$

它称为 **PP Neyman 统计量**. 李国英和査文星 (1991) 找到了 K_N 的极限分布, 而 K_N 的值可以用 NTM 来近似计算.

§ 6.4 多元正态性检验 (II)

上节我们讨论了多元正态性的检验. 本节我们继续研究这个问题, 并介绍一些新的多元正态性的检验方法, 它们基于熵, 密度估计, 投影追踪法及 NTM, 这是由朱力行, 黄开林与方开泰 (1993) 建议的.

已知具有 p.d.f. $p(\boldsymbol{x})$ 的 s- 维分布 $F(\boldsymbol{x})$ 的**熵**由

$$H(f) = -\int_D \log f(\boldsymbol{x})\, dF(\boldsymbol{x}) \tag{6.4.1}$$

定义, 其中 $D = \{\boldsymbol{x} : f(\boldsymbol{x}) > 0\}$ 为 f 的支撑. 命 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 为总体 F 的一个样本及 F_N 为它的经验分布; 又命 $\hat{f}$ 为用某个非参数方法得到的 f 的一个估计. 则**样本熵**具有形式

$$H_N(f) = -\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \log \hat{f}(\boldsymbol{x}_j). \tag{6.4.2}$$

当 $s = 1$ 时, Vasicek (1976) 建议用最近的邻域估计作为 $\hat{f}$:

$$\hat{f}(x) = \frac{N}{2m}\left(X_{(j+m)} - X_{(j-m)}\right), \quad \text{当} \quad x \in [X_{(j-m)}, X_{(j+m)}], \qquad j = 1, \cdots, N, \tag{6.4.3}$$

此处 $X_{(1)}, \cdots, X_{(N)}$ 为 $X_1, \cdots, X_N$ 的顺序统计量及 m 为一个正整数作为光滑参数. 已知标准正态分布 $N(0,1)$ 的熵为

$$H(\phi) = -\int_{-\infty}^{\infty} \log \phi(x)\, d\Phi(x) = \frac{1}{2}\log(2\pi e),$$

此处 ϕ 与 Φ 分别为 $N(0,1)$ 的 p.d.f. 与 c.d.f. 因此当 F 的均值与方差为 0 与 1 时, 我们可以用

$$T=\left|H_N(f)-\frac{1}{2}\log(2\pi e)\right|$$

或

$$T^*=\left|\exp\left(H_N(f)\right)-\exp\left(\frac{1}{2}\log\left(2\pi e\right)\right)\right|=\left|\exp\left(\left(H_N(f)\right)-\sqrt{2\pi e}\right)\right|$$

作正态性检验，这是因为对于任何 f 有 $H(f)\le\frac{1}{2}\log(2\pi e)$, 其中取等号的充要条件为 $f\equiv\phi$. 这一想法可以类似地推广至 $s>1$.

假定我们要检验假设 (6.3.1). 这等价于检验假设 (6.3.2). 命 $\boldsymbol{x}\sim F(\boldsymbol{x})$ 并有二阶矩，则对于任何 $\boldsymbol{a}\in R^s$ 有

$$Z(\boldsymbol{a})=\frac{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}'\boldsymbol{\mu}}{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{a}'}\sim N(0,1),$$

此处 $\boldsymbol{\mu}=E(\boldsymbol{x})$ 及 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{Cov}(\boldsymbol{x})$. 给予总体 $F(\boldsymbol{x})$ 的一个样本 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$, 我们可以求出样本均值矢量 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 及样本协方阵 $\boldsymbol{V}$ 与 $Z(\boldsymbol{a})$ 的一个估计

$$\hat{Z}(\boldsymbol{a})=\frac{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}'\bar{\boldsymbol{x}}}{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{V}\boldsymbol{a}}.$$

命 $(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})_{(1)},\cdots,(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})_{(N)}$ 为 $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}_N$ 的顺序统计量. 则 $\hat{Z}_1(\boldsymbol{a}),\cdots,\hat{Z}_{(N)}(\boldsymbol{a})$ 的顺序变量 $\hat{Z}_{(1)}(\boldsymbol{a})\le\hat{Z}_{(2)}(\boldsymbol{a})\le\cdots\le\hat{Z}_{(N)}(\boldsymbol{a})$ 具有形式

$$\hat{Z}_{(j)}(\boldsymbol{a})=\frac{(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x})_{(j)}-\boldsymbol{a}'\bar{\boldsymbol{x}}}{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{V}\boldsymbol{a}},\qquad j=1,\cdots,N. \tag{6.4.4}$$

类似于 Vasicek 的想法及考虑到稳健性，朱力行，黄开林与方开泰 (1993) 建议用

$$H_{Np}(\boldsymbol{a},f)=\frac{1}{(1-2p)N}\sum_{j=pN}^{(1-p)N}\left\{\log\frac{N}{2m}\left[\hat{Z}_{(j+m)}(\boldsymbol{a})-\hat{Z}_{(j-m)}(\boldsymbol{a})\right]\right\} \tag{6.4.5}$$

作为 $(2p)$- 截尾投影熵 $H_pp(\boldsymbol{a},f)$ 的估计，此处

$$H_p(\boldsymbol{a},f)=\frac{1}{1-2p}\int_{b_p}^{b_{1-p}}\log f_{\boldsymbol{a}}(z)\,dF_{\boldsymbol{a}}(z), \tag{6.4.6}$$

$f_{\boldsymbol{a}}$ 与 $F_{\boldsymbol{a}}$ 为 $Z(\boldsymbol{a})$ 的 p.d.f. 与 c.d.f. 及 b_p 与 b_{1-p} 为 $Z(\boldsymbol{a})$ 的 p 与 $1-p$ 分位数 (quantiles). p 的值应较小，例如 $p=0.01$. $N(0,1)$ 的 $(2p)$-截尾熵 是

$$H_p = \frac{1}{1-2p}\int_{Z_p}^{Z_{1-p}} \log\phi(x)\,dF(x), \tag{6.4.7}$$

此处 Z_p 与 Z_{1-p} 为 $N(0,1)$ 的 p 及 $1-p$ 分位数. 用 $Z(\boldsymbol{a})$ 可以将假设 (6.3.2) 表示为

$$H_0: Z(\boldsymbol{a}) \sim N(0,1), \qquad \boldsymbol{a}\in U_s. \tag{6.4.8}$$

因此我们推荐 Kolmogorov-Smirnov 型统计量

$$T_1(N,p) = \sup_{\boldsymbol{a}\in U_s}\left|\exp(H_{Np}(\boldsymbol{a},f)) - \exp(H_p)\right| \tag{6.4.9}$$

与 Cramer-von Miss 型统计量

$$T_2(N,p) = \int_{\boldsymbol{a}\in U_s}\{\exp(H_{Np}(\boldsymbol{a},f)) - \exp(H_p)\}^2 dv, \tag{6.4.10}$$

来检验 (6.4.8), 其中 dv 表示 U_s 的体积元素. 朱力行，黄开林与方开泰 (1993) 给出了 $T_1(N,p)$ 与 $T_2(n,p)$ 的大样本的一些性质. 这些性质表明两个统计量 $T_1(n,p)$ 与 $T_2(n,p)$ 都是合理的.

命 $\{\boldsymbol{a}_k, k=1,\cdots,n\}$ 为 U_s 上一个 NT-net. 若 n 较大，则假设 (6.4.8) 可以渐近地表示为

$$H_0: Z(\boldsymbol{a}_k) \sim N(0,1), \qquad k=1,\cdots,n, \tag{6.4.11}$$

而 $T_1(N,p)$ 与 $T_2(N,p)$ 的渐近值分别为

$$E_1(N,p) = \max_{1\le i\le n}\left|\exp(H_{Np}(\boldsymbol{a}_i,f)) - \exp(H_p)\right| \tag{6.4.12}$$

与

$$E_2(N,p) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{\exp(H_{Np}(\boldsymbol{a}_i,f)) - \exp(H_p)\}^2 \tag{6.4.13}$$

当 $N=30\sim100, s=2\sim5$ 及 $\alpha=1\%,5\%$ 与 10% 时，临界值 $T_1(N,p)$ 与 $T_2(N,p)$ 由表 6.7 与表 6.8 给出. 这些值均由蒙特卡罗模拟求得的.

表 6.6 $Sk_{\max}$, $Ku_{\max}$, T_1, T_2 之幂

No	随机矢量	$Sk_{\max}$	$Ku_{\max}$	T_1	T_2
1	$\boldsymbol{x}\sim N_4(\mathbf{0},\boldsymbol{I}_4)$	0.00	0.00	0.06	0.06
2	$\boldsymbol{x}=\{E_1,E_2,E_3,E_4\}$	1.00	0.94	1.00	1.00
3	$\boldsymbol{x}=\{\chi_1,\chi_2,\chi_3,\chi_4\}$	1.00	0.96	1.00	1.09
4	$\boldsymbol{x}\sim Mt_4(50,\mathbf{0},\boldsymbol{I}_4)$	0.00	0.02	0.06	0.06
5	$\boldsymbol{x}\sim U(B_4)$	0.00	0.00	1.00	0.88
6	$\boldsymbol{x}=\{G_1,G_2,G_3,G_4\}$	0.90	0.68	1.00	1.00
7	$\boldsymbol{x}=\{B_1,B_2,B_3,B_4\}$	1.00	0.90	1.00	1.00
8	$\boldsymbol{x}=\{N_3(0,\boldsymbol{I}_3),E_4\}$	0.76	0.46	0.98	1.00
9	$\boldsymbol{x}=\{N_2(0,\boldsymbol{I}_2),E_3,E_4\}$	0.96	0.80	1.00	1.00
10	$\boldsymbol{x}=\{N_3(0,\boldsymbol{I}_3),\chi_4\}$	0.92	0.52	1.00	1.00
11	$\boldsymbol{x}=\{N_2(0,\boldsymbol{I}_3),\chi_3,\chi_4\}$	0.98	0.70	1.00	1.00

对于不同分布研究 T_1 与 T_2 的幂，结果列于表 6.6 之中，此处 $\{E_1,E_2,E_3,E_4\}$ 表示 $E_1,\cdots,E_4$ 为独立的，且每一个皆有标准指数分布；$\{N_3(\mathbf{0},\boldsymbol{I}_3),E_4\}$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 的前三个分量有分布 $N_3(\mathbf{0},\boldsymbol{I}_3)$，且与有标准指数分布的 E_4 相独立. 对于其他分布也有类似解释，其中 χ 表示具有自由度 2 的 Chi 方分布，G 表示 gamma 分布 $G_a(2,1)$，及 B 表示 beta 分布 $Be(3,2)$. 表 6.6 列举了统计量 $Sk_{\max},Ku_{\max},T_1(N,p)$ 与 $T_2(N,p)$ 作为比较，其中 $\alpha=5\%$，$n=100$ 及 $s=4$. 我们看出 T_1 与 T_2 比 $Sk_{\max}$ 与 $Ku_{\max}$ 有更好的幂，读者不难从表 6.6 得到更多的信息.

表 6.7　$T_1(N, p)$ 的临界值, $P(T_1(N, p) > T_1(N, p, \alpha)) = \alpha$, $p = 1\%$

$d=2$	$n=180$			
样本大小	α	10%	5%	1%
30		1.312	1.395	1.575
40		1.087	1.164	1.327
50		0.806	0.866	0.997
60		0.696	0.751	0.849
70		0.642	0.691	0.776
80		0.595	0.633	0.729
90		0.562	0.598	0.669
100		0.534	0.568	0.640
$d=3$	$n=233$			
30		1.461	1.539	1.710
40		1.229	1.285	1.451
50		0.934	0.984	1.092
60		0.791	0.836	0.938
70		0.717	0.761	0.850
80		0.667	0.702	0.767
90		0.631	0.668	0.734
100		0.595	0.620	0.679
$d=4$	$n=266$			
30		1.503	1.572	1.680
40		1.238	1.300	1.407
50		0.967	1.017	1.143
60		0.821	0.856	0.949
70		0.736	0.781	0.855
80		0.688	0.723	0.802
90		0.645	0.675	0.748
100		0.614	0.645	0.705
$d=5$	$n=440$			
30		1.556	1.611	1.736
40		1.296	1.347	1.480
50		1.002	1.048	1.136
60		0.857	0.901	0.982
70		0.771	0.820	0.902
80		0.710	0.743	0.818
90		0.668	0.697	0.762
100		0.631	0.657	0.731

表 6.8　$T_2(N, p)$ 的临界值，$P(T_2(N, p) > T_2(N, p, \alpha)) = \alpha$，$p=1\%$

$d=2$	$n=180$			
样本大小	α	10%	5%	1%
30		0.569	0.653	0.833
40		0.369	0.419	0.543
50		0.231	0.254	0.319
60		0.155	0.172	0.212
70		0.128	0.141	0.176
80		0.109	0.121	0.146
90		0.097	0.107	0.127
100		0.087	0.095	0.117
$d=3$	$n=233$			
30		0.502	0.547	0.642
40		0.325	0.352	0.409
50		0.196	0.209	0.244
60		0.136	0.144	0.165
70		0.112	0.119	0.138
80		0.097	0.103	0.119
90		0.086	0.091	0.099
100		0.078	0.083	0.094
$d=4$	$n=266$			
30		0.482	0.509	0.552
40		0.304	0.325	0.361
50		0.184	0.195	0.214
60		0.127	0.134	0.146
70		0.105	0.110	0.118
80		0.091	0.095	0.103
90		0.081	0.084	0.091
100		0.074	0.077	0.085
$d=5$	$n=440$			
30		0.456	0.477	0.513
40		0.293	0.305	0.328
50		0.175	0.182	0.197
60		0.123	0.129	0.138
70		0.101	0.105	0.111
80		0.087	0.090	0.095
90		0.078	0.080	0.085
100		0.071	0.074	0.079

例 6.5 在多元分析文献中熟知 Iris Setosa, Iris versicolor 与 Tris virginica 数据集. 后面两组数据常常用作分类与聚类算法中的例子. 第一组数据则被 Rincon-Gallardo 等 (1979), Koziol (1982) 与 Csörgö (1989) 用来检验多元正交性. Iris Setosa 数据集首先是 Anderson (1935) 收集的, 而由 Fisher (1936) 加以分析的. Small (1980) 用偏态与峰态重新检查了这些数据后得出结论认为它们显著地偏离四元正态. Royston (1983) 用 Shapiro-Wilk W 检验也得到相同的结论. 我们在本节也利用这组数据.

Iris Setosa 数据包含了 50 个四元观测值. 这四个变元为:

X_1: 萼片长度, X_2: 萼片宽度,

X_3: 花瓣长度, X_4: 花瓣宽度,

人们已经用一元正交检验法证明萼片的长度与宽度不是正态分布, 而花瓣的长度与宽度是正态分布.

首先我们验证 $\boldsymbol{x} = (X_1, X_2, X_3, X_4)'$ 的四元正态性. 我们得到 $T_1(50, 1\%) = 2.396 > 0.991 = T_1(50, 1\%, 5\%)$ 及 $T_2(50, 1\%) = 0.7439 > 0.194 = T_2(50, 1\%, 5\%)$. 所以 $\boldsymbol{x}$ 不是正态的. 这与 Small (1980) 的结果是相容的. 其次考虑 $\boldsymbol{x}$ 的某些子集的检验如下:

$$\{X_1, X_2\}: \ T_1 = 0.8524,\ T_2 = 0.2299,\ A \ (\text{接受});$$

$$\{X_1, X_3\}: \ T_1 = 1.7858,\ T_2 = 0.4322,\ R \ (\text{拒绝});$$

$$\{X_1, X_4\}: \ T_1 = 3.4154,\ T_2 = 2.6100,\ R;$$

$$\{X_2, X_3\}: \ T_1 = 1.4948,\ T_2 = 0.2794,\ R;$$

$$\{X_2, X_4\}: \ T_1 = 3.3753,\ T_2 = 2.3215,\ R;$$

$$\{X_3, X_4\}: \ T_1 = 3.3299,\ T_2 = 2.0559,\ R.$$

由 T_1 与 T_2 的值表示凡涉及到 X_3 与 X_4 的子集都是非正态的. 建议读者对于 $\boldsymbol{x}$ 的三个分量组成的子集作同样的工作.

§ 6.5 球性检验

"球性检验" 可以有各种含义. 给出多元正态分布 $N_s(\mathbf{0},\mathbf{\Sigma})$ 的一个样本 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N$. 我们要检验零分布的球性 (定义 2.1), 它等价于检验 $\mathrm{H}_0:\mathbf{\Sigma}=\boldsymbol{I}_s$. 在多元分析中, 这个检验通常称为球性检验. 或者, 考虑两类椭球对称分布: $\mathcal{F}_0=\{F(\boldsymbol{x}):F(\boldsymbol{x})$ 为球分布并有一个 p.d.f.$\}$ 及 $\mathcal{F}_1=\{F(\boldsymbol{x}):F(\boldsymbol{x})$ 是椭球分布 $EC_s(\mathbf{0},\mathbf{\Sigma},g)$ 并有一个 p.d.f.$\}$, 我们要检验球对称性, 即 $H_0:F(\boldsymbol{x})\in\mathcal{F}_0$, $H_1:F(\boldsymbol{x})\in\mathcal{F}_1$, 这是另一类球性检验 (方开泰与张尧庭 (1990) §5.5). 本节我们考虑意义更广泛的球性检验. 给出一个 s- 维分布函数 $G(\boldsymbol{x})$, 我们要求检验球性假设

$$\begin{aligned} &H_0:\ G(\boldsymbol{x}) \quad \text{为球分布,} \\ &H_1:\ G(\boldsymbol{x}) \quad \text{为非球分布.} \end{aligned} \tag{6.5.1}$$

下面的事实是方开泰, Kotz 与吴启宏 ((1990) 定理 2.5) 指出的:

引理 6.1 令 $\boldsymbol{x}\in R^s$ 是一个随机向量, 则 $\boldsymbol{x}$ 遵从球对称分布当且仅当对每个 $\boldsymbol{a}\in U_s$ 有

$$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}\overset{\mathrm{d}}{=}X_1,$$

这里 X_1 为 $\boldsymbol{x}$ 的第一个分量.

注意到引理 6.1, 假设 (6.5.1) 能变为

$$\begin{aligned} &H_0: \quad \text{所有 } \boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a}\in U_s, \text{ 有相同的分布,} \\ &H_1: \quad \text{存在 } \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\in U_s, \text{ 使 } \boldsymbol{a}'\boldsymbol{x} \text{ 和 } \boldsymbol{b}'\boldsymbol{x} \text{有不同的分布.} \end{aligned} \tag{6.5.2}$$

令 $\{\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_m\}$ 是 U_p 上的一个 NT-net. 若 m 足够大, 假设 (6.5.2) 可近似为

$$H_0^*:\boldsymbol{a}_i'\boldsymbol{x},\quad i=1,\cdots,m, \text{有相同的分布.} \tag{6.5.3}$$

方开泰，朱力行和 Bentler (1993) 建议用 **Wilcoxon 型统计量** 来检验 (6.5.3). 对给定 $0 < k < l \leq m$, 考虑一个 **二样本问题**：

$$\text{I}: \quad \boldsymbol{a}_k'\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_k'\boldsymbol{x}_N,$$

$$\text{II}: \quad \boldsymbol{a}_l'\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_l'\boldsymbol{x}_N,$$

其中 $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 是来自总体的一个样本. 这个二样本问题的 Wilcoxon 型统计量 (Serfling (1980), 175 页) 是

$$V_N(\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_l) = \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} I\{\boldsymbol{a}_k'\boldsymbol{x}_i < \boldsymbol{a}_l'\boldsymbol{x}_j\}, \tag{6.5.4}$$

其中 $I\{A\}$ 为 A 的示性函数. 下面的统计量

$$T_N = \min_{\substack{1 \leq k, l \leq m \\ k \neq l}} \{V_N(\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_l)\} \tag{6.5.5}$$

被推荐来用于检验假设 (6.5.3)

剩下的问题是求得 T_N 的分布. 当 N 和 m 较小时，统计模拟可以帮助我们获得分布的近似. 当 N 大时，可以利用 T_N 的极限分布. 注意到构造 $V_N(\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_l)$ 的是两个相依样本，而不是两个独立样本，因此有别于传统的二样本 Wilcoxon 统计量. 当 $\boldsymbol{a}_k$ 相互正交时，方开泰、朱力行和 Bentler (1993) 给出了 T_N 的极限分布如下：

定理 6.1 设 G 是球对称分布且原点有概率 0. 则行随机向量 $\{\sqrt{N}(V_N(\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_l) - \frac{1}{2}) : \boldsymbol{a}_k \perp \boldsymbol{a}_l, 1 \leq k < l \leq s\}$ 收敛到一个 $s(s-1)/2$ 维的正态分布 $N(\boldsymbol{0}, \frac{1}{12}\boldsymbol{V})$. 其中 $\boldsymbol{V}$ 的元素由下式给出

$$V(k, l, k_1, l_1) = \begin{cases} 0, & \text{当 } k, l, l_1, k_1, \text{互不相同}, \\ 1, & \text{当 } k = k_1,\ l \neq l_1 \text{ 或 } k \neq k_1,\ l = l_1, \\ 2, & \text{当 } k = k_1 \text{ 和 } l = l_1, \\ -1, & \text{当 } k = l_1 \text{ 或 } k_1 = l. \end{cases} \tag{6.5.6}$$

我们看到 $\{\sqrt{N}(V_N(\boldsymbol{a}_k,\boldsymbol{a}_l)-\frac{1}{2}):1\le k<l\le s\}$ 的极限分布不依赖于 G, 从而 $(T_N-\frac{1}{2})$ 的极限分布也不依赖于 G.

定理 6.2 在定理 6.1 的假定下，对任何实数 λ 有

$$\lim_{n\to\infty} P\left\{\sqrt{N}\Big(T_N-\frac{1}{2}\Big)\le -\lambda\right\}$$
$$=P\left\{\min_{\substack{1\le k,l\le s\\ k\ne l}}\{Y_l-Y_k\}\le -\lambda\right\}$$
$$=1-\int_{-\infty}^{\infty} s(\Phi(\sqrt{12}\lambda+z)-\Phi(z))^{s-1}\phi(z)\,dz, \tag{6.5.7}$$

其中 $Y_1,\cdots,Y_s$ 是遵从 $N(0,1/12)$, 相互独立的随机变量， $\Phi(\cdot)$ 和 $\phi(\cdot)$ 分别为标准正态分布的分布函数和分布密度.

利用定理 6.2, 我们能对 G 的球性设计一个必要性检验. 因为在 H_0 假设下，对任意 s 个正交方向 $\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_s, G$ 有相同的边际分布. 满足于

$$P\left\{\min_{\substack{1\le k,l\le s\\ k\ne l}}\{Y_l-Y_k\}\le -\lambda_\alpha\right\}=\alpha \tag{6.5.8}$$

的临界值列于表 6.9. 上述定理的证明由方开泰、朱力行和 Bentler (1993) 给出. 为什么我们称这个检验为必要性检验呢？因为在 H_0 假设下， G 在任意个 s 维正交方向有相同的边际分布，这是必要条件. 因此，若 $\min_{\substack{1\le k,l\le s\\ k\ne l}}\{Y_l-Y_k\}>-\lambda_\alpha$, 假设 H_0 在显著性水平 α 下被拒绝；另一方面，若 $\min_{\substack{1\le k,l\le s\\ k\ne l}}\{Y_l-Y_k\}<-\lambda_\alpha$, 假设并不真正被接受.

现在我们来研究 $\boldsymbol{V}$ 的性质. 显然， $\boldsymbol{V}$ 是退化的，我们来寻求 $\boldsymbol{V}$ 的特征根和它的秩. 下面我们首先给一个例子来说明 $\boldsymbol{V}$ 的性质，然后叙述一般结果.

例 6.6 当 $s=4$, 由 (6.5.6) 能够算出协差阵 $\boldsymbol{V}$, 其结果如下:

$$\boldsymbol{V}=\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} (1,2) & (1,3) & (1,4) & (2,3) & (2,4) & (3,4) \end{array} \\ \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \end{array}. \tag{6.5.9}$$

我们来证明 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{V})=s-1=3$, $\boldsymbol{V}$ 的特征根为 0 和 4 . 注意

$$|\boldsymbol{V}-\lambda\boldsymbol{I}|=\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} (1,2) & (1,3) & (1,4) & (2,3) & (2,4) & (3,4) \end{array} \\ \begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 2-\lambda & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} \end{array}.$$

作列变换 $(2,3)\Longrightarrow(2,3)+(1,2)-(1,3)$, $(2,4)\Longrightarrow(2,4)+(1,2)-(1,4)$ 及 $(3,4)\Longrightarrow(3,4)+(1,2)-(1,4)$ 获得

$$|\boldsymbol{V}-\lambda\boldsymbol{I}|=\lambda^3\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} (1,2) & (1,3) & (1,4) & (2,3) & (2,4) & (3,4) \end{array} \\ \begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{vmatrix} \end{array}.$$

然后再作列变换 $(1,2)\Longrightarrow(1,2)-(2,3)-(2,4)$, $(1,3)\Longrightarrow(1,3)+$

$(2,3)-(3,4)$ 及 $(1,4)\Longrightarrow(1,4)+(2,4)+(3,4)$ 获得

$$|V-\lambda I|=\lambda^3\begin{array}{c} \begin{matrix}(1,2) & (1,3) & (1,4) & (2,3) & (2,4) & (3,4)\end{matrix} \\ \begin{vmatrix} 4-\lambda & 0 & 4-\lambda & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 4-\lambda & 4-\lambda & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 4-\lambda & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}\end{array}$$

$$=(-\lambda)^3(4-\lambda)^3.$$

这表明存在一个正交阵 Q 使得

$$Q'VQ=s\begin{pmatrix} I_{s-1} & O \\ O & O \end{pmatrix},$$

利用在例 6.6 中使用过的同样技巧，我们获得如下的一般结果：

引理 6.2 对 $s\geq 2$, 存在一个 $Q\in O\big(s(s-1)/2\big)$, 后者为 $\frac{s(s-1)}{2}$ 阶的正交矩阵集合，使得

$$Q'VQ=s\begin{pmatrix} I_{s-1} & O \\ O & O \end{pmatrix}, \tag{6.5.10}$$

证明 考虑行列式 $|V-\lambda I|=|\{u(k,l):1\leq k<l\leq s\}|=0$, 这里 $u(k,l)$ 为列向量. 首先，对一切 $1<k<l\leq s$ 作列变换 (为简单计，略去 u)

$$(k,l)\Longrightarrow(k,l)+(1,k)-(1,l),$$

然后，将因子 $\lambda^{(s-1)(s-2)/2}$ 提出行列之外. 最后我们再作下面的列变换

$$(1,l)\Longrightarrow(1,l)+(2,l)+\cdots(l-1,l)-(l,l+1)-\cdots-(l,p),$$
$$l=2,\cdots,p,$$

求得

$$|\boldsymbol{V}-\lambda \boldsymbol{I}|=(-\lambda)^{(s-1)(s-2)/2}(s-\lambda)^{s-1}. \quad \square$$

现在我们来讨论如何应用上述的球性必要性检验. 首先, 我们需要随机地选择 s 个相互正交的方向 $\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_s$, 这等价于产生一个随机正交阵 $\boldsymbol{G}$, 使 $\boldsymbol{G}$ 在 $\boldsymbol{O(s)}$ 上均匀分布 即 $\boldsymbol{U(O(s))}$. 下节我们将详尽地讨论这个问题.

在投影方向选定后, 要计算 $\sqrt{N}(T_N-\frac{1}{2})$ 的值, 然后用该值与 $\alpha=1\%$ 或 $\alpha=5\%$ 的临界值 λ_α 相比, 后者列于表 6.9 (对 $3\le s\le 10$ 的情形).

表 6.9　λ_α 的临界值

s	$\alpha=1\%$	$\alpha=5\%$	s	$\alpha=1\%$	$\alpha=5\%$
3	1.19	0.96	7	1.41	1.21
4	1.27	1.05	8	1.44	1.24
5	1.33	1.12	9	1.47	1.27
6	1.38	1.17	10	1.49	1.49

下面我们来作一个模拟, 一组样本来自于一个四元分布, 其分布密度为

$$\frac{\Gamma(10)}{(10\pi)^2\Gamma(5)}(1+\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}/10)^{-7}.$$

运用蒙特卡罗方法产生一个大小为 200 的样本, 再产生一个随机正交阵 $\boldsymbol{G}=(\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_4)$, 计算 $V_N(\boldsymbol{a}_i,\boldsymbol{a}_j)$ 及 $\sqrt{N}(T_N-\frac{1}{2})$. 在表 6.10 中我们给出 $\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_4$, $V(i,j)\equiv V_N(\boldsymbol{a}_i,\boldsymbol{a}_j), 1\le i,j\le 4$, 及 $\sqrt{200}(T_{200}-\frac{1}{2})$ 的数值结果. 然后比较 $\sqrt{200}(T_{200}-\frac{1}{2})=-0.4968$ 和 $\lambda_{0.01}$ 或 $\lambda_{0.05}$, 它们是表 6.9 中 $s=4$ 时的临界值. 并接受样本来自于一个球对称分布的假设.

表 6.10 $\boldsymbol{a}_i$ 和 $V(i, j)$ 的值

$\boldsymbol{a}_1$	0.81480	-0.19538	-0.01916	-0.54549
$\boldsymbol{a}_2$	0.23949	-0.00261	-0.88917	0.38990
$\boldsymbol{a}_3$	0.03868	0.95250	-0.11488	-0.27936
$\boldsymbol{a}_4$	0.52654	0.23357	0.44251	0.68730
$V(1, j)$	0.50000	0.46651	0.49595	0.46487
$V(2, j)$	0.63349	0.50000	0.53314	0.49648
$V(3, j)$	0.50405	0.46056	0.50000	0.47196
$V(4, j)$	0.53513	0.50352	0.52804	0.50000
T_{200}			0.46487	

进一步，如果实际问题严格要求分布是球对称的，运用上面的方法只是在一组相互正交的方向上进行球性检验是不够的. 这时，我们可吸收 **Bonferroni 多重比较** 的思想，即随机地产生 p 个随机正交矩阵 $\boldsymbol{G}_i, i=1,\cdots,p$, 例如 $p=5$. 然后用 α/p 及 $\lambda_{\alpha/p}$ 作为相应的新显著性水平和临界值，例如 $\alpha=0.05, p=5$ 时，$\alpha/p=0.01$. 令 $T_N^{(i)}$ 是相应于 $\boldsymbol{G}_i$ 的统计量，这时用于球性检验的统计量为 $\min_{1\le i\le p}\sqrt{N}(T_N^{(i)}-\frac{1}{2})$. 当然，研究 $\min_{1\le i\le p}\sqrt{N}(T_N^{(i)}-\frac{1}{2})$ 的极限分布是一个有兴趣的课题.

§ 6.6 投影寻踪

6.6.1 投影寻踪法

术语 “**投影寻踪**” (projection pursuit, PP) 最初由 Friedman 和 Tukey (1974) 所采用. 而由 Huber (1985) 加以全面讨论. PP 法是通过精选的低维正交投影来揭示数据的结构. 因为我们不能直接观察到三维以上空间的图形，在实际中，投影将投到一维或二维空间.

令 $\boldsymbol{X}$ 为一个 $N\times p$ 观测值矩阵，其中 p 表示变数个数及 N

纲示观测值数. 对任意 $\boldsymbol{a} \in R^p$, $\boldsymbol{Xa}$ 是一个 N 维列矢量, 它是原样本至方向 $\boldsymbol{a}$ 的正交投影. 不失一般性, 我们总是假定 $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{a} = 1$, 或 $\boldsymbol{a} \in U_p$. 若 H 是一个函数, 可用来度量一维样本的有关性质, 那么 $I(\boldsymbol{a}) \equiv H(\boldsymbol{Xa})$ 称为 **投影指数** (projection index). 例如, 在 §6.3 的 $(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}_N)$ 的偏态和峰态是两个投影指数. PP 法是寻求投影方向 $\boldsymbol{a}$ 它使 $I(\boldsymbol{a})$ 达到全局最优, 或至少使 $I(\boldsymbol{a})$ 达局部最优.

主成分分析 (**principal component analysis, PCA**), **典型相关分析** (**canonical correlation analysis**) 以及 **相应分析** (**correspondence analysis**) 和 PP 有着同样的思想. 例如, 在 PCA 中, $I(\boldsymbol{a})$ 为 $\boldsymbol{Xa}$ 的样本方差之和. 幸运的是, 在这些方法中我们能够找到使 $I(\boldsymbol{a})$ 全局最优的解析解. 一般而言, 我们必须用数值的优化方法求得 $I(\boldsymbol{a})$ 的最优近似解. 例如 $I(\boldsymbol{a})$ 为样本偏态和峰态 (§6.3). 设 $I(\boldsymbol{a})$ 在 U_p 上连续, 因此我们可以用 SNTO 求极大值 $\max_{\boldsymbol{a}\in U_p} I(\boldsymbol{a})$ 的近似值和相应的极大方向 $\boldsymbol{a}^*$, 在 §6.3 中我们曾利用过这个思想.

当正交投影到一个 q 维子空间且 $q > 1$ 时, $\boldsymbol{a}$ 由一个 $p \times q$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 所代替, 故 $\boldsymbol{XA}$ 是一个 $N \times q$ 阵, 相应的投影指数成为 $I(\boldsymbol{A}) = H(\boldsymbol{XA})$. 对绝大多数情形, 我们能假定 $\boldsymbol{A} \in O(p,q)$, 这里

$$O(p,q)) = \{\boldsymbol{U} : \boldsymbol{U} : p \times q,\ \boldsymbol{U}'\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}_q\} \tag{6.6.1}$$

是 **Stiefel 流形**. 显然, 当 $p = q$ 时, $O(p,q) = O(p)$. 若我们打算用 SNTO 在 $O(p,q)$ 中来寻求最优的 $\boldsymbol{A}^*$, 则我们需要一个方法来产生一组矩阵, 它们在 $\boldsymbol{O(p,q)}$ **上均匀散布**, 即为 $\boldsymbol{O(p,q)}$ **的** NT-net.

在 $O(p,q)$ 上生成一个 NT-net 的最简单的方法是用下面的定理, 它是 (2.2.23) 的推广.

定理 6.3 命随机矩阵 $\boldsymbol{X}$ 在 $O(p,q)$ 上均匀分布. 则 $\boldsymbol{X}$ 有一个随机表示

$$\boldsymbol{X} \stackrel{\mathrm{d}}{=} \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y})^{-1/2}, \tag{6.6.2}$$

此处$\boldsymbol{Y}$是一个随机矩阵，其元素有 i.i.d. 每一元素皆服从标准正态分布 $N(0,1)$, 即 $\boldsymbol{Y}$ 有一个**矩阵正态分布** $N_{p\times q}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{I}_q)$, 其中 $\boldsymbol{A}^{-\frac{1}{2}}$ 表示 $\boldsymbol{A}$ 的非负定方根.

定理 6.3 的证明见方开泰与张尧庭 ((1990), 101 页). 命 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_q)$ 为一个 $p\times q$ 矩阵. 定义一个 pq 维矢量

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \cdots\\ \boldsymbol{a}_q\end{pmatrix} \tag{6.6.3}$$

此处 "vec" 可以理解为一个算子. 显然若 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y})\sim N_{pq}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_{pq})$ 时， $\boldsymbol{Y}\sim N_{p\times q}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{I}_q)$. 由 (6.6.2) 我们建议下面的算法:

第 1 步　在 C^{pq} 上生成一个 NT-net $\{\boldsymbol{c}_k,\ k=1,\cdots,n\}$, 再由以前介绍的方法 (§4.2) 即可得 $N_{pq}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_{pq})$ 的一组代表点 $\{\boldsymbol{y}_k,k=1,\cdots,n\}$, 从而得到 $N_{p\times q}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{I}_q)$ 的代表点集 $\{\boldsymbol{Y}_k,k=1,\cdots,n\}$, 满足 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y}_k)=\boldsymbol{y}_k,k=1,\cdots,n$.

第 2 步　得到 $O(p,q)$ 上的一个 NT-net

$$\mathcal{P}_F=\{\boldsymbol{X}_k=\boldsymbol{Y}_k(\boldsymbol{Y}_k'\boldsymbol{Y}_k)^{-\frac{1}{2}},k=1,\cdots,n\}.$$

这个算法很简单，但当 n 小时， $\mathcal{P}_F$ 在 $O(p,q)$ 上的均匀性并不好. $O(p,q)$ 的维数是 $d_{pq}=pq-q(q+1)/2$. 我们用 pq 个自由度的变数去生成一个 d_{pq} 维流形，浪费了 $q(q+1)/2$ 个变数自由度. 这是导至 $\mathcal{P}_F$ 的均匀性不好的原因.

方开泰与李润泽 (1993) 建议了另一个仅用 d_{pq} 个变数的方法.

事实上， q 个相互正交的投影方向可以依次决定如下: 任取 $\boldsymbol{a}_1\in U_p$, 考虑 $\boldsymbol{a}_1$ 的 $(p-1)$ 维正交补子空间，在这个子空间中任取 $\boldsymbol{a}_2^*$, 它相应于 R^p 中的一个向量 $\boldsymbol{a}_2\in U_p$. 然后考虑 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2$ 的 $(p-2)$ 维的正交补子空间，在该空间里取 $\boldsymbol{a}_3^*$, 它相应于 R^p 中的一个向量 $\boldsymbol{a}_3\in U_p$. 如此下去，直至 q 个方向 $\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_q$ 被依次决定为止. 例如当 $p=3,q=2$ 时，我们在 U_3 中任取 $\boldsymbol{a}_1$. 现在 $\boldsymbol{a}_1$ 的正交补子空间是一个二维平面，在这个平面上取方向 $\boldsymbol{a}_2^*$, 它决

定了 R^3 中的一个方向 $\boldsymbol{a}_2 \in U_3$，于是 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\}$ 是 R^3 中的一对相互正交的方向. 由 (1.5.27), $\boldsymbol{a}_1$ 由两个角度 ϕ_1 和 ϕ_2 决定, $\boldsymbol{a}_2$ 只由一个角 ϕ_3 决定. 因此, 如果在 C^3 上选一个 NT-net, 那么利用 (1.5.27) 和上面的算法，我们可以得到一个在 $O(3,2)$ 上均匀散布的矩阵. 为了获得一个有效的算法，我们需要解决如下两个问题:

(a) 对任意给定的 t 个相互正交的方向 $\{\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_t\}$, 如何求它们的正交子空间 $R_\perp^{p-t}$?

(b) 对任一个在 $R_\perp^{p-t}$ 中的向量 $\boldsymbol{a}^*$, 如何将它们表为 R^p 中的一个向量?

有趣的是，这两个问题能够用矩阵代数中的所谓的 Givens 变换满意地获得解决.

6.6.2 Givens 变换

定义 6.1 一个 p 阶的 **Givens 矩阵** 是一个形如

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{G}_{ij} \equiv& \boldsymbol{G}_{ij}(\phi_{ij})\\
=& \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{i-1} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \cos\phi_{ij} & \boldsymbol{0} & -\sin\phi_{ij} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_{j-i+1} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \sin\phi_{ij} & \boldsymbol{0} & \cos\phi_{ij} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_{p-j} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{6.6.4}
$$

的正交矩阵，其中 $i<j$, $\phi_{ij} \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$.

令 $\boldsymbol{U} \equiv (u_{ij})$ 是一个 $p \times q$ 阵，则除了第 i 和第 j 行之外 $\boldsymbol{G}'_{ij}\boldsymbol{U} \equiv (u^*_{ij})$ 和 $\boldsymbol{U}$ 有相同的行矢量，而 $\boldsymbol{G}'_{ij}\boldsymbol{U}$ 的第 i 和第 j 行成为

$$
\begin{aligned}
u^*_{ik} &= u_{ik}\cos\phi_{ij} + u_{jk}\sin\phi_{ij}, \\
u^*_{jk} &= -u_{ik}\sin\phi_{ij} + u_{jk}\cos\phi_{ij},
\end{aligned}
\qquad k = 1,\cdots,q.
$$

若令 $u^*_{ji} = 0$, 则有 $u_{ii}\sin\phi_{ij} = u_{ji}\cos\phi_{ij}$, 从而

$$
\phi_{ij} = \begin{cases} \pi/2, & \text{若} u_{ii} = 0, \\ \arctan(u_{ji}/u_{ii}), & \text{其余情况} \end{cases}
\tag{6.6.5}
$$

今后，我们取$\boldsymbol{G}_{ij}\,(i<j)$，其中 ϕ_{ij} 由 (6.6.5) 给出，即 $u_{ji}^*=0$. 因此， $\boldsymbol{G}_{ij}$ 可视为一个矩阵算子.

将多个 Givens 矩阵作用于一个矩阵$\boldsymbol{A}$,可使$\boldsymbol{A}$的某一列,除一个元素外,其它元素全为零.例如,当$\boldsymbol{U}\in U(p,q)$,$\boldsymbol{G}_{1p}'\boldsymbol{G}_{1,p-1}'\cdots\boldsymbol{G}_{12}'\boldsymbol{U}$的第一列的元素除了第一个元素不为零外，其它元素全为零，由于$\boldsymbol{U}'\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}_q$，故第一个元素必为 ±1.

因为 $(\boldsymbol{G}_{1p}'\cdots\boldsymbol{G}_{12}')\boldsymbol{U}\in O(p,q)$，我们有

$$\boldsymbol{U}^{(2)}=\boldsymbol{G}_{1p}'\cdots\boldsymbol{G}_{12}'\boldsymbol{U}^{(1)}=\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{U}_2\end{pmatrix}, \tag{6.6.6}$$

其中 $\varepsilon_1=\pm1,\boldsymbol{U}^{(1)}=\boldsymbol{U}$ 及 $\boldsymbol{U}_2\in O(p-1,q-1)$. 类似地，对于 $t=2,3,\cdots,q$

$$\boldsymbol{G}_{tp}'\cdots\boldsymbol{G}_{t,\,t+1}'\boldsymbol{U}^{(t)}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_t & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{U}_{t+1}\end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{U}^{(t+1)},$$

此处 $\boldsymbol{U}_{t+1}\in O(p-t,q-t)$,$\boldsymbol{\varepsilon}_t=\operatorname{diag}(\varepsilon_1,\cdots,\varepsilon_t)$ 及 $\varepsilon_j=\pm1$, $j=1,\cdots,t$. 最后

$$\boldsymbol{G}_{qp}'\cdots\boldsymbol{G}_{q,q+1}'\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_q\\ \boldsymbol{0}\end{pmatrix}. \tag{6.6.7}$$

因此我们得到下面本质上属于 Anderson, Olkin 与 Underhill (1987) 的定理.

定理 6.4 任何$\boldsymbol{U}\in O(p,q)$ 皆可以表示为

$$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{G}_{12}\cdots\boldsymbol{G}_{1p})(\boldsymbol{G}_{23}\cdots\boldsymbol{G}_{2p})\cdots(\boldsymbol{G}_{q,q+1}\cdots\boldsymbol{G}_{q,p})\begin{pmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}_q\\ \boldsymbol{0}\end{pmatrix}, \tag{6.6.8}$$

此处$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\operatorname{diag}(\varepsilon_1,\cdots,\varepsilon_q)$, $\varepsilon_j=\pm1$, $j=1,\cdots,q$; 及$\boldsymbol{G}_{ij}$ 为 Givens 矩阵， $-\pi/2<\phi_{ij}\le\pi/2$, $i=1,\cdots,q$, $j=i+1,\cdots,p$. 特别，当 $p=q$, $\boldsymbol{U}$ 有 **参数表示**

$$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{G}_{12}\cdots\boldsymbol{G}_{1p})(\boldsymbol{G}_{23}\cdots\boldsymbol{G}_{2p})\cdots(\boldsymbol{G}_{p-1,p})\boldsymbol{\varepsilon}_p. \tag{6.6.9}$$

定理 6.5 假定随机矩阵 $\boldsymbol{U}$ 在 $O(p,q)(q \le p)$ 上均匀分布. 命 $\boldsymbol{U}$ 表成它的随机表示 (6.6.8). 则

(i) $\boldsymbol{G}_{ij}(i=1,\cdots,q,\ j=1,\cdots,p; i<j)$ 及 $\varepsilon_j(j=1,\cdots,q)$ 相互独立; 或 $\phi_{ij}(i=1,\cdots,q,\ j=1,\cdots,p,\ i<j)$ 及 $\varepsilon_j(j=1,\cdots,q)$ 相互独立.

(ii) $P(\varepsilon_j=1)=P(\varepsilon_j=-1)=0.5, j=1,\cdots,q.$

(iii) ϕ_{ij} 的联合分布为

$$c\left(\prod_{j=2}^{p}\cos^{j-2}\phi_{ij}\right)\left(\prod_{j=3}^{p}\cos^{j-3}\phi_{2j}\right)\cdots\left(\prod_{j=q+1}^{p}\cos^{j-q-1}\phi_{qj}\right), \tag{6.6.10}$$

此处 c 为正则化常数.

如果我们直接用定理6.4与定理6.5及逆变换法来生成 $O(p,q)$ 上的一个 NT-net, 则需很长的计算时间来寻求 F_j 的逆 (或其近似), 此处 c.d.f. F_j 有 p.d.f.

$$p_j(\phi)=\begin{cases}\dfrac{1}{B\left(\dfrac{1}{2},\dfrac{j-2+1}{2}\right)}\cos^{j-2}(\phi), & \text{当} -\pi/2 \le \phi < \pi/2,\\ 0, & \text{其他情况}.\end{cases}$$

我们已在 §4.3 讨论了这个困难并推荐使用 TFWW 算法来生成 U_s 上的一个 NT-net. 这个方法不涉及 F_j 的逆的计算. 事实上, TFWW 算法在目前情况是可以用的. 已知 $\boldsymbol{U} \sim U(O(p,q))$ 的每一列皆服从 U_p 上的均匀分布 (方开泰与张尧庭 (1990)). 记 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\cdots,\boldsymbol{u}_q)$. 则 $\boldsymbol{V}_1=(\boldsymbol{G}_{12}\cdots\boldsymbol{G}_{1p})\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_{p-1}\end{pmatrix}$ 的第一列 $\boldsymbol{v}_1$ 正好是 $\boldsymbol{u}_1$. 所以 $\boldsymbol{v}_1 \sim U(U_p)$. 进而言之, $\boldsymbol{V}_1$ 完全由 $\boldsymbol{v}_1$ 决定. 因此, 若我们能够生成 $\boldsymbol{v}_1 \sim U(U_p)$, 则得 $\boldsymbol{V}_1$. 由 $\boldsymbol{V}_1$ 的定义可得

$$\begin{cases}v_{11}=\varepsilon_1\cos(\theta_{1p})\cos(\theta_{1,p-1})\cdots\cos(\theta_{12}),\\ \cdots\\ v_{1,p-1}=\varepsilon_1\cos(\theta_{1p})\sin(\theta_{1,p-1})\\ v_{1p}=\varepsilon_1\sin(\theta_{1p})\end{cases} \tag{6.6.11}$$

此处$\boldsymbol{v}_1=(v_{11},\cdots,v_{1p})'$. 因 $-\pi/2<\theta_{ij}\le\pi/2$, 我们有 $\varepsilon_1=\text{sign}\,(v_{11})$, 此处 sign$(\cdot)$ 表示符号函数. 如果我们用 TFWW 算法生成 $\boldsymbol{v}_1$, 则可以用 (6.6.11) 得到 $\boldsymbol{V}_1$. 进而言之, 命

$$\begin{cases} y_1=v_{11}/v_{12}=\text{ctg}\,(\theta_{12}), \\ y_2=v_{12}/v_{13}=\sin(\theta_{12})\text{ctg}\,(\theta_{13}), \\ \cdots \\ y_{p-1}=v_{1,p-1}/v_{1p}=\sin(\theta_{1,p-1})\text{ctg}\,(\theta_{1p}), \\ y_p=v_{1p}=\varepsilon_1\sin(\theta_{1p}) \end{cases} \tag{6.6.12}$$

及 $z_1=1, z_i=\sin\theta_{1i}, i=2,\cdots,p$. 我们可以递推地计算

$$\begin{aligned} &z_p=\sin\theta_{1p}=\varepsilon_1 y_p, \\ &z_i=y_i z_{i+1}/\sqrt{1-z_{i+1}^2}\,\text{sign}(z_{i+1}), \qquad i=p-1,\cdots,2, \end{aligned} \tag{6.6.13}$$

因此我们可以将 $\cos(\theta_{ij})$ 表为

$$\cos(\theta_{ij})=y_{j-1}z_j/z_{j-1}, \qquad j=2,\cdots,p. \tag{6.6.14}$$

将 $\cos(\theta_{ij}),\sin(\theta_{ij})$ 与 ε_1 代入 $\boldsymbol{V}_1$. 我们可以将 $\boldsymbol{V}_1$ 的元素表示为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{V}_1(i,1)=v_{1i}, \qquad i=1,\cdots,p, \\ &\boldsymbol{V}_1(k,k)=y_{k-1}z_k/z_{k-1}, \qquad k=2,\cdots,p, \\ &\boldsymbol{V}_1(l,k)=0, \qquad 3\le k<l\le p-1, \\ &\boldsymbol{V}_1(l,k)=-z_k z_{k-1}\prod_{j=1}^{k-2}y_j, \qquad 1\le l<k\le p. \end{aligned} \tag{6.6.15}$$

类似地, 我们记

$$\boldsymbol{V}_k=\boldsymbol{G}_{k,k+1}\cdots\boldsymbol{G}_{kp}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_{k-1} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \varepsilon_k & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_{p-k}\end{pmatrix}, \qquad k=2,\cdots,q,$$

并将 $\boldsymbol{V}_k$ 的元素用一个在 U_{p-k+1} 上均匀分布的矢量表示出来. 最后我们得到

$$
U = V_1, \cdots, V_q \begin{pmatrix} I_q \\ 0 \end{pmatrix}.
$$

基于上述讨论及 TFWW 算法，方开泰与李润泽 (1993) 建议了一个在 $O(p,q)$ 上生成 NT-net 的算法．他们的结果表明无论从均匀度或计算时间来说，结果都是很满意的．

习题

6.1 令 $X \sim Ga(\beta,\lambda)$ 为在 (2.6.1) 中定义的伽玛分布，下面的数据是从总体 $Ga(\beta,\lambda)$ 中抽取的一个样本

1.5128	17.6464	22.7419	8.9765	5.5807
9.6622	6.8015	2.9317	6.5333	4.3420
12.8354	12.1527	7.5309	22.2337	2.2453
4.4472	17.0835	20.2310	5.7031	11.6051
7.5139	3.6220	11.4734	5.2327	1.9192
11.5441	15.7105	9.8498	9.0798	10.8729
3.8403	3.3202	2.8350	6.0044	9.4557
9.3823	7.1123	19.4210	3.7043	13.5312
12.2513	18.0835	10.0428	8.6268	11.6838
10.8290	10.2125	23.0184	5.2033	11.8362

(a) 求 β 和 λ 的矩估计 $\hat{\beta}^*$ 和 $\hat{\lambda}^*$.

(b) 利用 $\hat{\beta}^*, \hat{\lambda}^*$ 和 SNTO, 求 β 和 λ 的极大似然估计．

6.2 令

$$
\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 984 & 562 & 476 & 1208 & 870 \\ 562 & 391 & 324 & 734 & 517 \\ 476 & 324 & 299 & 542 & 437 \\ 1208 & 734 & 642 & 1535 & 1079 \\ 870 & 517 & 437 & 1079 & 777 \end{pmatrix}.
$$

求 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 Cholesky 根．

6.3 试用例 6.3 所列的数据集回答下面的问题：

(a) 利用统计量 $Sk_{\max}$ 和 $Ku_{\max}$ 检验 $\boldsymbol{x}=(X_1,X_3,X_8,X_{10})'$ 的多元正态性.

(b) 若在 (a) 中的假设被接受，则 $\boldsymbol{x}$ 能够认为来自于一个正态总体 $N_4(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$. 给出 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的矩估计 $\hat{\boldsymbol{\mu}}^*$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^*$.

(c) 利用 SNTO 和 $(\hat{\boldsymbol{\mu}}^*,\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^*)$ 求 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$.

6.4 用例 6.5 中的数据集，对于下面的三元素子集 $\{X_1,X_2,X_3\}$, $\{X_1,X_2,X_4\}$, $\{X_1,X_3,X_4\}$ 与 $\{X_2,X_3,X_4\}$ 检验它们的多元正态性.

6.5 用一个 U_s 上的 NT-net, 对于有投影算法的最小体积椭球估计，写出一个计算程序.

6.6 写出生成具有随机表示 (6.6.2) 的 $O(p,q)$ 上 NT-net 的计算程序.

附 录 A

glp 集合表

A.1 具有大 n 的 *glp* 集合

以下 12 张表的数据基本上取自华罗庚与王元 (1981) 的书 "Applications of Number Theory to Numerical Analysis, Springer-Verlag and Science Press". 作者对于 Springer-Verlag 允许他们将这些数据置于本书中表示感谢. 在这些表中, 生成矢量 $(n; h_1, \cdots, h_s)$ 具有 $h_1 = 1$, 而对应的 *glp* 集合则有形式

$$\left(\frac{k-0.5}{n}, \left\{\frac{h_2k-0.5}{n}\right\}, \cdots, \left\{\frac{h_sk-0.5}{n}\right\}\right) \quad (1 \le k \le n)$$

华罗庚与王元 (1981) 原来表中的 $W_2(n,\boldsymbol{h})$, $W_4(n,\boldsymbol{h})$ 与 $\rho(n,\boldsymbol{h})$ 则被略去了. 以下的表主要用于计算多重定积分, 特别是多元分布的概率与矩, 及用于最优化.

表 A.1　$s = 2\ (n = F_m,\ h_1 = 1,\ h_2 = F_{m-1})$

n	8	13	21	34	55	89	144	233	377	610
h_2	5	8	13	21	34	55	89	144	233	377

n	987	1597	2584	4181	6765	10,946	17,711	28,657	46,368	75,025
h_2	610	987	1597	2584	4181	6765	10,946	17,711	28,657	46,368

表 A.2　$s = 3,\ h_1 = 1$

n	35	101	135	185	266	418	597	828	1010
h_2	11	40	29	26	27	90	63	285	140
h_3	16	85	42	64	69	130	169	358	237

n	1220	1459	1626	1958	2440	3237	4044	5037	6066
h_2	319	256	572	202	638	456	400	580	600
h_3	510	373	712	696	1002	1107	1054	1997	1581

n	8191	10,007	20,039	28,117	39,029	57,091	82,001	140,052	314,694
h_2	739	544	5704	19,449	10,607	48,188	21,252	34,590	77,723
h_3	5515	5733	12,319	5600	26,871	21,101	67,987	112,313	252,365

表 A.3　$s = 4,\ h_1 = 1$

n	307	562	701	1019	2129	3001	4001	5003	6007
h_2	42	53	82	71	766	174	113	792	1351
h_3	229	89	415	765	1281	266	766	1889	5080
h_4	101	221	382	865	1906	1269	2537	191	3086

n	8191	10,007	20,039	28,117	39,029	57,091	82,001	100,063	147,312
h_2	2488	1206	19,668	17,549	30,699	52,590	57,270	92,313	136,641
h_3	5939	3421	17,407	1900	34,367	48,787	58,903	24,700	116,072
h_4	7859	2842	14,600	24,455	605	38,790	17,672	95,582	76,424

表 A.4　$s = 5,\ h_1 = 1$

n	1069	1543	2129	3001	4001	5003	6007	8191
h_2	63	58	618	408	1534	840	509	1386
h_3	762	278	833	1409	568	117	780	4302
h_4	970	694	1705	1681	3095	3593	558	7715
h_5	177	134	1964	1620	2544	1311	1693	3735

n	10,007	15,019	20,039	33,139	51,097	71,053	100,063	374,181
h_2	198	10,641	11,327	32,133	44,672	33,755	90,036	343,867
h_3	9183	2640	11,251	17,866	45,346	65,170	77,477	255,381
h_4	6967	6710	12,076	21,281	7044	12,740	27,253	310,881
h_5	8507	784	18,677	32,247	14,242	6878	6222	115,892

表 A.5 $s = 6,\ h_1 = 1$

n	2129	3001	4001	5003	6007	8191	10,007	15,019
h_2	41	233	1751	2037	312	1632	2240	8743
h_3	1681	271	1235	1882	1232	1349	4093	8358
h_4	793	122	1945	1336	5943	6380	1908	6559
h_5	578	1417	844	4803	4060	1399	931	2795
h_6	279	51	1475	2846	5250	6070	3984	772

n	20,039	33,139	51,097	71,053	100,063	114,174	302,686
h_2	5557	18,236	9931	18,010	43,307	107,538	285,095
h_3	150	1831	7551	3155	15,440	88,018	233,344
h_4	11,951	19,143	29,683	50,203	39,114	15,543	41,204
h_5	2461	5522	44,446	6065	43,534	80,974	214,668
h_6	9179	22,910	17,340	13,328	29,955	56,747	150,441

表 A.6 $s = 7,\ h_1 = 1$

n	3997	11,215	15,019	24,041	33,139	46,213	57,091	71,053
h_2	3888	10,909	12,439	1833	7642	37,900	35,571	31,874
h_3	3564	10,000	2983	18,190	9246	17,534	45,299	36,082
h_4	3034	8512	8607	21,444	5584	41,873	51,436	13,810
h_5	2311	6485	7041	23,858	23,035	32,280	34,679	6605
h_6	1417	3976	7210	1135	32,241	15,251	1472	68,784
h_7	375	1053	6741	12,929	30,396	26,909	8065	9848

n	84,523	100,063	172,155	234,646	462,891	769,518	957,838
h_2	82,217	39,040	167,459	228,245	450,265	748,528	931,711
h_3	75,364	62,047	153,499	209,218	412,730	686,129	854,041
h_4	64,149	89,839	130,657	178,084	351,310	584,024	726,949
h_5	48,878	6347	99,554	135,691	267,681	444,998	553,900
h_6	29,969	30,892	61,040	83,197	164,124	272,843	339,614
h_7	7936	64,404	18,165	22,032	43,464	72,255	89,937

表 A.7　$s=8,\ h_1=1$

n	3997	11,215	24,041	28,832	33,139	46,213	57,091	71,053
h_2	3888	10,909	17,441	27,850	3520	5347	17,411	60,759
h_3	3564	10,000	21,749	24,938	29,553	30,775	46,802	26,413
h_4	3034	8512	5411	20,195	3239	35,645	9779	24,409
h_5	2311	6485	12,326	13,782	1464	11,403	16,807	48,215
h_6	1417	3976	3144	5918	16,735	16,894	35,302	51,048
h_7	375	1053	21,024	25,703	19,197	32,016	1416	19,876
h_8	3211	9010	6252	15,781	3019	16,600	47,755	29,096

n	84,523	100,063	172,155	234,646	462,891	769,518	957,838
h_2	82,217	4344	167,459	228,245	450,265	748,528	931,711
h_3	75,364	58,492	153,499	209,218	412,730	686,129	854,041
h_4	64,149	29,291	130,657	178,084	351,310	584,024	726,949
h_5	48,878	60,031	99,554	135,691	267,681	444,998	553,900
h_6	29,969	10,486	61,040	83,197	164,124	272,843	339,614
h_7	7936	22,519	18,165	22,032	43,464	72,255	89,937
h_8	67,905	60,985	138,308	188,512	371,882	618,224	769,518

表 A.8　$s=9,\ h_1=1$

n	3997	11,215	33,139	42,570	46,213	57,091	71,053
h_2	3888	10,909	68	41,409	8871	20,176	26,454
h_3	3564	10,000	4624	37,957	40,115	12,146	13,119
h_4	3034	8512	16,181	32,308	20,065	23,124	27,174
h_5	2311	6485	6721	24,617	30,352	2172	17,795
h_6	1417	3976	26,221	15,094	15,654	33,475	22,805
h_7	375	1053	26,661	3997	42,782	5070	43,500
h_8	3211	9010	23,442	34,200	17,966	42,339	45,665
h_9	1962	5506	3384	20,901	33,962	36,122	49,857

n	100,063	159,053	172,155	234,646	462,891	769,518	957,838
h_2	70,893	60,128	167,459	228,245	450,265	748,528	931,711
h_3	53,211	101,694	153,499	209,218	412,730	686,129	854,041
h_4	12,386	23,300	130,657	178,084	351,310	584,024	726,949
h_5	27,873	43,576	99,554	135,691	267,681	444,998	553,900
h_6	56,528	57,659	61,040	83,197	164,124	272,843	339,614
h_7	16,417	42,111	18,165	22,032	43,464	72,255	89,937
h_8	17,628	85,501	138,308	188,512	371,882	618,224	769,518
h_9	14,997	93,062	84,523	115,204	227,266	377,811	470,271

表 A.9　$s=10,\ h_1=1$

n	4661	13,587	24,076	58,358	85,633
h_2	4574	13,334	23,628	57,271	37,677
h_3	4315	12,579	22,290	54,030	35,345
h_4	3889	11,337	20,090	48,695	3864
h_5	3304	9631	17,066	41,366	54,821
h_6	2570	7492	13,276	32,180	74,078
h_7	1702	4961	8790	21,307	30,354
h_8	715	2084	3692	8950	57,935
h_9	4289	12,502	22,153	53,697	51,906
h_{10}	3122	9100	16,125	39,086	56,279

n	103,661	115,069	130,703	155,093	805,098
h_2	45,681	65,470	64,709	90,485	790,101
h_3	57,831	650	53,373	20,662	745,388
h_4	80,987	95,039	17,385	110,048	671,792
h_5	9718	77,293	5244	102,308	570,685
h_6	51,556	98,366	29,008	148,396	443,949
h_7	55,377	70,366	52,889	125,399	293,946
h_8	37,354	74,605	66,949	124,635	123,470
h_9	4353	55,507	51,906	10,480	740,795
h_{10}	27,595	49,201	110,363	44,198	539,222

表 A.10　$s = 11,\ h_1 = 1$

n	4661	13,587	24,076	58,358	297,974
h_2	4574	13,334	23,628	57,271	294,481
h_3	4315	12,579	22,290	54,030	284,041
h_4	3889	11,337	20,090	48,695	266,778
h_5	3304	9631	17,066	41,366	242,894
h_6	2570	7492	13,276	32,180	212,668
h_7	1702	4961	8790	21,307	176,456
h_8	715	2084	3692	8950	134,682
h_9	4289	12,502	22,153	53,697	87,835
h_{10}	3122	9100	16,125	39,086	36,464
h_{11}	1897	5529	9797	23,747	279,147

n	698,047	1,243,423	2,226,963	7,494,007
h_2	685,041	1,228,845	2,200,854	7,354,408
h_3	646,274	1,185,282	2,122,833	6,838,211
h_4	582,461	1,113,244	1,993,814	6,253,169
h_5	494,796	1,013,577	1,815,311	5,312,043
h_6	384,914	887,449	1,589,415	4,132,365
h_7	254,860	736,338	1,318,777	2,736,109
h_8	107,051	562,016	1,006,567	1,149,286
h_9	642,292	366,527	656,448	6,895,461
h_{10}	467,527	152,163	272,523	5,019,180
h_{11}	284,044	1,164,860	2,086,257	3,049,402

表 A.11　$s = 12, 13, 14,\ h_1 = 1$

n	18,984	53,328	77,431	297,974	1,243,423
h_2	18,761	52,703	76,523	294,481	1,228,845
h_3	18,096	50,834	73,810	284,041	1,185,282
h_4	16,996	47,745	69,324	266,778	1,113,244
h_5	15,475	43,470	63,118	242,894	1,013,577
h_6	13,549	38,061	55,264	212,668	887,449
h_7	11,242	31,580	45,854	176,456	736,338
h_8	8581	24,104	34,998	134,682	562,016
h_9	5596	15,720	22,825	87,835	366,527
h_{10}	2323	6526	9476	36,464	152,163
h_{11}	17,785	49,959	72,539	279,147	1,164,860
h_{12}	14,053	39,477	57,320	220,583	920,477
h_{13}	10,158	28,534	41,430	159,433	665,302
h_{14}	6,143	17,255	25,054	96,414	402,327

n	2,428,705	14,753,436	19,984,698	34,248,063
h_2	2,400,231	14,580,465	19,750,396	33,846,536
h_3	2,315,141	14,063,582	19,050,236	32,646,662
h_4	2,174,435	13,208,845	17,892,427	30,662,508
h_5	1,979,761	12,026,276	16,290,543	27,917,337
h_6	1,733,402	10,529,739	14,263,366	24,443,334
h_7	1,438,245	8,736,780	11,834,661	20,281,228
h_8	1,097,753	6,668,420	9,032,903	15,479,816
h_9	715,916	4,348,908	5,890,941	10,095,390
h_{10}	297,211	1,805,439	2,445,610	4,191,077
h_{11}	2,275,252	13,821,268	18,722,002	32,084,164
h_{12}	1,797,913	10,921,619	14,794,199	25,353,030
h_{13}	1,299,495	7,893,924	10,692,946	18,324,655
h_{14}	785,841	4,773,681	6,466,329	11,081,440

表 A.12 $s = 15, 16, 17, 18,\ h_1 = 1$

n	70,864	139,489	1,139,691	2,422,957
h_2	70,353	138,484	1,131,480	2,398,094
h_3	68,825	135,476	1,106,904	2,323,761
h_4	66,291	130,487	1,066,142	2,200,720
h_5	62,768	123,553	1,009,487	2,030,234
h_6	58,283	114,724	937,347	1,814,052
h_7	52,867	104,063	850,242	1,554,392
h_8	46,559	91,647	748,799	1,253,920
h_9	39,405	77,566	633,750	915,717
h_{10}	31,457	61,921	505,923	543,256
h_{11}	22,772	44,825	366,239	140,357
h_{12}	13,412	26,401	215,705	2,134,112
h_{13}	3445	6781	55,406	1,683,011
h_{14}	63,806	125,597	1,026,186	1,214,641
h_{15}	52,844	104,019	849,882	733,806
h_{16}	41,501	81,691	667,455	
h_{17}	29,859	58,775	480,219	
h_{18}	18,002	35,435	289,522	

n	4,395,774	14,271,038	55,879,244
h_2	4,364,102	14,168,215	55,476,633
h_3	4,269,316	13,860,486	54,271,700
h_4	4,112,097	13,350,069	52,273,127
h_5	3,893,578	12,640,642	49,495,314
h_6	3,615,335	11,737,315	45,958,274
h_7	3,279,371	10,646,597	41,687,493
h_8	2,888,108	9,376,347	36,713,742
h_9	2,444,365	7,935,718	31,072,856
h_{10}	1,951,338	6,335,088	24,805,477
h_{11}	1,412,580	4,585,990	17,956,764
h_{12}	831,972	2,701,027	10,576,061
h_{13}	213,699	693,780	50,314,090
h_{14}	3,957,988	12,849,750	41,669,876
h_{15}	3,277,986	10,642,098	32,725,430
h_{16}	2,574,365	8,357,770	23,545,197
h_{17}	1,852,197	6,013,224	14,195,319
h_{18}	1,116,683	3,625,352	2,716,545

A.2 具有小 n 的 glp 集合

以下的表,对于小的 n, 给出具有 $h_1 = 1$ 的生成矢量 $(n; h_1, \cdots, h_s)$. 选取生成矢量所用的准则为 (MSE). 所以, 这些表特别适用于试验设计, 这些表是袁克海算出来的. 用其它准则得到的生成矢量可以在第五章中找到.

表 A.13 $s = 2,\ h_1 = 1$

n	5	7	9	11	13	15	17	19	21	23	25	27	29	31
h_2	2	3	4	7	5	11	5	14	13	9	7	16	23	21

表 A.14 $s = 3,\ h_1 = 1$

n	5	7	9	11	13	15	17	19	21	23	25	27	29	31
h_2	2	2	2	3	3	2	3	3	4	15	8	20	16	11
h_3	4	4	4	5	9	7	9	9	10	18	14	22	24	28

表 A.15 $s = 4,\ h_1 = 1$

n	7	9	11	13	15	17	19	21	23	25	27	29	31
h_2	2	2	2	6	2	2	5	2	2	4	5	4	15
h_3	3	4	5	8	4	4	7	10	5	6	17	6	19
h_4	6	7	7	10	8	8	9	17	10	9	25	16	22

表 A.16 $s = 5,\ h_1 = 1$

n	11	13	15	17	19	21	23	25	27	29	31
h_2	3	6	2	3	4	2	6	4	2	14	2
h_3	4	8	4	9	6	10	11	6	4	18	4
h_4	5	9	7	10	7	13	13	9	8	20	8
h_5	9	10	13	13	17	16	20	11	16	22	16

表 A.17　$s = 6,\ h_1 = 1$

n	11	13	17	19	21	23	25	27	29	31
h_2	2	2	3	4	2	5	8	2	14	6
h_3	4	3	5	5	4	6	12	4	18	9
h_4	5	4	9	6	8	11	14	5	19	11
h_5	8	6	10	7	11	13	18	8	20	28
h_6	10	8	13	17	16	20	21	16	22	29

表 A.18　$s = 7,\ h_1 = 1$

n	13	17	19	21	23	25	27	29	31
h_2	2	3	2	2	2	8	2	5	5
h_3	3	5	4	4	4	12	4	14	7
h_4	4	9	7	5	8	14	5	18	8
h_5	6	10	8	8	9	18	8	19	10
h_6	8	13	13	10	16	19	10	20	14
h_7	12	15	16	19	18	21	16	22	16

表 A.19　$s = 8,\ h_1 = 1$

n	17	19	23	25	27	29	31
h_2	3	2	2	2	2	2	5
h_3	5	4	4	3	4	3	7
h_4	9	7	8	4	5	4	8
h_5	10	8	9	6	8	6	10
h_6	11	13	13	9	10	8	14
h_7	13	14	16	12	16	12	16
h_8	15	16	18	18	20	16	19

表 A.20　$s = 9,\ h_1 = 1$

n	17	19	23	25	27	29	31
h_2	3	2	2	2	4	2	5
h_3	5	4	3	3	7	3	7
h_4	9	7	4	4	10	4	8
h_5	10	8	8	6	13	6	10
h_6	11	9	9	9	16	8	14
h_7	13	13	13	11	19	12	16
h_8	15	14	16	12	22	16	18
h_9	16	16	18	18	25	24	19

表 A.21 $s = 10, 11, 12,\ h_1 = 1$

n	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}	h_{11}	h_{12}
19	2	4	7	8	9	13	14	16	18		
23	2	3	4	6	8	9	12	13	16		
25	2	3	4	6	8	9	11	12	18		
27	2	4	5	8	10	13	16	20	26		
29	2	3	4	6	8	12	16	19	24		
31	4	5	7	8	10	14	16	18	19		
23	2	3	4	6	8	9	12	13	16	18	
25	2	3	4	6	8	9	11	12	18	24	
29	2	3	4	6	8	9	12	16	19	24	
31	4	5	6	9	11	13	19	23	28	29	
23	2	4	5	8	9	10	11	16	17	20	22
29	6	11	12	13	15	19	21	22	24	25	27
31	4	5	7	8	9	10	14	16	18	19	25

表 A.22 $s = 13, 14, 15,\ h_1 = 1$

n	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}	h_{11}	h_{12}	h_{13}	h_{14}	h_{15}
29	2	3	4	6	7	8	9	12	16	18	19	24		
31	2	4	5	7	8	10	14	16	18	19	20	25		
29	2	3	4	6	7	8	9	12	14	16	18	19	24	
31	2	4	5	7	8	10	14	16	18	19	20	25	28	
29	2	3	4	6	7	8	9	12	14	16	18	19	24	28
31	2	4	5	7	8	9	10	14	16	18	19	20	25	28

附 录 B

在区域D上的积分和均匀分布

命 D 为 s 维空间上的有界闭区域，考虑在其上的一个多重积分

$$I=\int_D g(x_1,\cdots,x_s)\,dx_1\cdots dx_s. \tag{B.1}$$

将 $x_1,\cdots,x_s$ 通过一个一对一变换，变为新的变量 $y_1,\cdots,y_s$

$$\begin{cases} x_1=f_1(y_1,\cdots,y_s), \\ \quad\cdots \\ x_s=f_s(y_1,\cdots,y_s), \end{cases} \tag{B.2}$$

其中 f_i 为连续可微函数， $i=1,\cdots,s$. 变换表成 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})$ 或 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{f}^{-1}(\boldsymbol{x})$. $\partial\boldsymbol{x}/\partial\boldsymbol{y}$ 的行列式的绝对值记为

$$\begin{aligned} J(\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{y}) &= \det\left(\frac{\partial(x_1,\cdots,x_s)}{\partial(y_1,\cdots,y_s)}\right)_+ \\ &= \det\begin{bmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial y_1} & \cdots & \dfrac{\partial x_s}{\partial y_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial x_1}{\partial y_s} & \cdots & \dfrac{\partial x_s}{\partial y_s} \end{bmatrix}_+, \end{aligned} \tag{B.3}$$

它称为 $\boldsymbol{x}$ 到 $\boldsymbol{y}$ 变换的雅可比. 现在 (B.1) 可以表为

$$I=\int_{D^*} g\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})\big)J(\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{y})\,d\boldsymbol{y}, \tag{B.4}$$

其中

$$D^*=\{\boldsymbol{y}:\boldsymbol{y}=\boldsymbol{f}^{-1}(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{x}\in D\}. \tag{B.5}$$

更一般地，若 y_i 的数目为 $t \le s$, 即

$$\begin{cases} x_1 = f_1(y_1, \cdots, y_t), \\ \quad \cdots \\ x_s = f_s(y_1, \cdots, y_t), \end{cases} \tag{B.6}$$

这时公式 (B.4) 仍旧成立 (华罗庚 (1984), 第八章). 但

$$J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{y}) = \det(\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}')^{1/2}, \tag{B.7}$$

$$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial y_1} & \cdots & \dfrac{\partial x_s}{\partial y_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial x_1}{\partial y_t} & \cdots & \dfrac{\partial x_s}{\partial y_t} \end{pmatrix}. \tag{B.8}$$

令随机矢量 $\boldsymbol{x} = (X_1, \cdots, X_s)'$ 在 D 上均匀分布，则 $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 为

$$p(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1/v(D), & 若\ \boldsymbol{x} \in D, \\ 0, & 其余, \end{cases} \tag{B.9}$$

其中

$$v(D) = \int_{D^*} J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{y})\, d\boldsymbol{y} \tag{B.10}$$

是 D 的体积. 考虑变换

$$X_i = f_i(Y_1, \cdots, Y_t), \qquad i = 1, \cdots, s, \quad t \le s.$$

则 $Y_1, \cdots, Y_t$ 的密度为

$$\frac{1}{v(D)} J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{y}).$$

若后者能表为 t 个一元密度函数的乘积，即

$$\frac{1}{v(D)} J(\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{y}) = \prod_{j=1}^{t} p_j(y_j), \tag{B.11}$$

则我们能断言

(a) $Y_1, \cdots, Y_t$ 相互独立；

(b) Y_j 的密度是 $p_j(y_j)$, $j=1,\cdots,t$.

现在，我们将运用上述一般理论至 $D=A_s, B_s, U_s, V_s$ 和 T_s 之情形.

B.1 区域 A_s

考虑积分

$$I_1=\int_{A_s} f(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}, \tag{B.12}$$

其中

$$A_s=\{(x_1,\cdots,x_s):\ 0\le x_1\le x_2\le\cdots\le x_s\le 1\} \tag{B.13}$$

由 (1.4.5) 所定义. 令 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1(\boldsymbol{\phi})$ 为如下变换

$$\begin{cases} x_1=\phi_1\phi_2\cdots\phi_s, \\ x_2=\phi_2\cdots\phi_s, \\ \quad\cdots \\ x_{s-1}=\phi_{s-1}\phi_s, \\ x_s=\phi_s, \end{cases} \tag{B.14}$$

其中 $\boldsymbol{\phi}=(\phi_1,\cdots,\phi_s)\in C^s$. 该变换将 C^s 映象至 A_s. 令

$$\boldsymbol{T}_1=\left(\frac{\partial x_j}{\partial\phi_i}\right)=(t_{ij}),\qquad i,\ j=1,\cdots,s.$$

显然 $\boldsymbol{T}_1$ 是一个下三角阵，变换的雅可比为

$$\begin{aligned} J_1(\boldsymbol{\phi}_1)&=\det(\boldsymbol{T}_1)_+=t_{11}t_{22}\cdots t_{ss}=\prod_{i=1}^{s}\frac{\partial x_i}{\partial\phi_i} \\ &=(\phi_2\cdots\phi_s)(\phi_3\cdots\phi_s)\cdots(\phi_s)(1) \\ &=\prod_{i=2}^{s}\phi_i^{i-1}. \end{aligned} \tag{B.15}$$

因此，我们得

$$I_1 = \int_{C^s} f(\boldsymbol{x}_1(\boldsymbol{\phi})) \prod_{i=2}^{s} \phi_i^{i-1} \, d\boldsymbol{\phi}. \tag{B.16}$$

特别当 $f \equiv 1$ 时我们有

$$\begin{aligned} v(A_s) = I_1 = \int_{A_s} dv &= \int_{C_s} \prod_{i=2}^{s} \phi_i^{i-1} \, d\boldsymbol{\phi} \\ &= \prod_{i=1}^{s} \int_0^1 \phi_i^{i-1} \, d\,\phi_i = 1/s!. \end{aligned} \tag{B.17}$$

令 $\boldsymbol{x} = (X_1, \cdots, X_s)$ 在 A_s 上均匀分布，则 $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 为，

$$p_1(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} s!, & \text{若 } \boldsymbol{x} \in A_s, \\ 0, & \text{其余}. \end{cases}$$

考虑变换 (B.14)，则 $\phi_1, \cdots, \phi_s$ 的联合密度函数为

$$p_1(\boldsymbol{x}_1(\boldsymbol{\phi}))\, J_1(\boldsymbol{\phi}) = s! \prod_{i=2}^{s} \phi_i^{i-1} = \prod_{i=1}^{s} (i\phi_i^{i-1}).$$

这表明：

(a) $\phi_1, \cdots, \phi_s$ 相互独立；

(b) ϕ_j 有 p.d.f. $j\phi^{j-1}$, $1 \le j \le s$, 从而有 c.d.f.

$$F_j(\phi) = \begin{cases} 0, & \phi < 0, \\ \phi^j, & 0 \le \phi \le 1, \\ 1, & \phi > 1. \end{cases} \tag{B.18}$$

B.2 区域 B_s 和 U_s

令 B_s 和 U_s 是 R^s 中的单位球和单位球面，即

$$B_s = \left\{ (x_1, \cdots, x_s) : x_1^2 + \cdots + x_s^2 \le 1 \right\} \tag{B.19}$$

和

$$U_s = \{(x_1, \cdots, x_s) : x_1^2 + \cdots + x_s^2 = 1\}. \tag{B.20}$$

考虑积分

$$I_2 = \int_{B_s} f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}$$

作球坐标变换 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_2(\boldsymbol{\phi})$ 如下

$$\begin{cases} x_1 = \phi_1 \cos(\pi\phi_2), \\ x_2 = \phi_1 \sin(\pi\phi_2)\cos(\pi\phi_3), \\ \quad\cdots \\ x_{s-1} = \phi_1 \sin(\pi\phi_2)\cdots\sin(\pi\phi_{s-1})\cos(2\pi\phi_s), \\ x_s = \phi_1 \sin(\pi\phi_2)\cdots\sin(\pi\phi_{s-1})\sin(2\pi\phi_s), \end{cases} \tag{B.21}$$

其中 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_s) \in C^s$. 该变换将 C^s 映象至 B_s，我们欲求变换的雅可比，下面的方法很简单，它基于如下的引理.

引理 B.1 若

$$\begin{cases} y_1 = f_1(x_1, \cdots, x_n), \\ y_2 = f_2(y_1, x_2, \cdots, x_n), \\ \quad\cdots \\ y_n = f_n(y_1, y_2, \cdots, y_{n-1}, x_n), \end{cases}$$

则 $(y_1, \cdots, y_n) \to (x_1, \cdots, x_n)$ 的雅可比为

$$\begin{aligned} & J\big((y_1, \cdots, y_n) \to (x_1, \cdots, x_n)\big) \\ = & \prod_{i=1}^{n} J(y_i \to x_i) = \prod_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial f_i}{\partial x_i}\right|. \end{aligned} \tag{B.22}$$

证明 令

$$t_{ij} = \begin{cases} \dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}, & i \le j, \\ 0, & i > j, \end{cases}$$

$$g_{ij} = \begin{cases} -\dfrac{\partial f_i}{\partial y_j}, & j < i, \\ 1, & i = j, \\ 0, & j > i, \end{cases}$$

$\boldsymbol{T}=(t_{ij})$, $\boldsymbol{G}=(g_{ij})$, $d\boldsymbol{x}=(dx_1,\cdots,dx_n)'$ 及 $d\boldsymbol{y}=(dy_1,\cdots,dy_n)'$.
因 $y_i=f_i(y_1,\cdots,y_{i-1},x_i,\cdots,x_n)$, y_i 的微分为

$$\begin{aligned}dy_i&=\sum_{j=1}^{i-1}\frac{\partial f_i}{\partial y_j}dy_j+\sum_{j=i}^{n}\frac{\partial f_i}{\partial x_j}dx_j\\&=-\sum_{j=1}^{i-1}g_{ij}dy_j+\sum_{j=i}^{n}t_{ij}dx_j,\end{aligned}$$

即

$$\boldsymbol{G}d\boldsymbol{y}=\boldsymbol{T}d\boldsymbol{x}\qquad\text{或}\qquad d\boldsymbol{y}=\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{T}d\boldsymbol{x}.$$

因此，雅可比为

$$J(\boldsymbol{y}\to\boldsymbol{x})=|\det(\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{T})|_+=|\det(\boldsymbol{G}^{-1})|_+\,|\det(\boldsymbol{T})|_+.$$

因为 $\boldsymbol{G}$ 是上三角阵，其对角元素为 1, 故 $\boldsymbol{G}^{-1}$ 也是上三角阵，对角元素也为 1, 从而 $\det(\boldsymbol{G}^{-1})=1$. 注意 $\boldsymbol{T}$ 是一个下三角阵，由

$$J(\boldsymbol{y}\to\boldsymbol{x})=|\det(\boldsymbol{T})|_+=\prod_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial f_i}{\partial x_i}\right|.$$

得引理之结论.

今应用引理 B.1 到 (B.21), 将指出

$$J_2(\boldsymbol{\phi})=J(\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{\phi})=2\pi^{s-1}\phi_1^{s-1}\prod_{i=2}^{s-1}\sin^{s-i}(\pi\phi_i).\tag{B.23}$$

事实上，我们有

$$x_s^2=\phi_1^2\Big(\prod_{i=2}^{s-1}\sin^2(\pi\phi_i)\Big)\sin^2(2\pi\phi_s),$$

$$x_{s-1}^2+x_s^2=\phi_1^2\prod_{i=2}^{s-1}\sin^2(\pi\phi_i),$$

$$\cdots$$

$$x_2^2+\cdots+x_s^2=\phi_1^2\sin^2(\pi\phi_2),$$

$$x_1^2+\cdots+x_s^2=\phi_1^2.$$

由引理 B.1 得

$$J(x_s \to \phi_s) = 2\pi(\phi_1^2/x_s)\prod_{i=2}^{s-1}\sin^2(\pi\phi_i)\sin(2\pi\phi_s)\cos(2\pi\phi_s),$$

$$J(x_{s-1} \to \phi_{s-1}) = \pi(\phi_1^2/x_{s-1})\prod_{i=2}^{s-2}\sin^2(\pi\phi_i)\sin(\pi\phi_{s-1})\cos(\pi\phi_{s-1}),$$

$$\cdots$$

$$J(x_2 \to \phi_2) = \pi(\phi_1^2/x_2)\sin(\pi\phi_2)\cos(\pi\phi_2),$$

$$J(x_1 \to \phi_1) = \phi_1/x_1,$$

因此

$$J_2(\boldsymbol{\phi}) = \prod_{i=1}^{s} J(x_i \to \phi_i) = 2\pi^{s-1}\phi_1^{s-1}\prod_{i=2}^{s-1}\sin^{s-i}(\pi\phi_i)$$

从而完成了 (B.23) 的证明.

由 (B.23) 得

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{B_s} f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x} \\ &= 2\pi^{s-1}\int_{C^s} f(\boldsymbol{x}_2(\boldsymbol{\phi}))\phi_1^{s-1}\prod_{i=2}^{s-1}\sin^{s-i}(\pi\phi_i)\,d\phi_i. \end{aligned} \tag{B.24}$$

特别， B_s 的体积为

$$\begin{aligned} v(B_s) &= 2\pi^{s-1}\int_0^1 \phi_1^{s-1}\,d\phi_1 \prod_{i=2}^{s-1}\int_0^1 \sin^{s-i}(\pi\phi_i)\,d\phi_i \\ &= \frac{2}{s}\prod_{i=2}^{s} B\Big(\frac{1}{2}, \frac{s-i+1}{2}\Big), \end{aligned}$$

其中用到对任意正整数 m 有

$$\int_0^1 \sin^m(\pi x)\,dx = \frac{1}{\pi}B\Big(\frac{1}{2}, \frac{m+1}{2}\Big).$$

因为

$$B\left(\frac{1}{2}, \frac{m+1}{2}\right)=\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m+2}{2}\right)}$$

及

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi},$$

所以有

$$v(B_s)=\frac{2\pi^{s/2}}{s\Gamma(s/2)}. \tag{B.25}$$

令 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)$ 在 B_s 上均匀分布，则 $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 为

$$p_2(\boldsymbol{x})=\begin{cases}\dfrac{s\Gamma(s/2)}{2\pi^{s/2}}, & 若\ \boldsymbol{x}\in B_s,\\ 0, & 其余,\end{cases}$$

在 (B.23) 中的 $\phi_1,\cdots,\phi_s$ 的 p.d.f. 为

$$\begin{aligned}p_2(\boldsymbol{x}_2(\boldsymbol{\phi}))J_2(\boldsymbol{\phi})&=\frac{s\Gamma(s/2)}{2\pi^{s/2}}2\pi^{s-1}\phi_1^{s-1}\prod_{i=2}^{s-1}\sin^{s-i}(\pi\phi_i)\\&=(s\phi_1^{s-1})\prod_{i=2}^{s-1}\frac{\pi\sin^{s-i}(\pi\phi_i)}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{s-i+1}{2}\right)}\end{aligned}$$

这表明

(a) $\phi_1,\cdots,\phi_s$ 相互独立；

(b) ϕ_1 有 p.d.f.

$$p_1(\phi)=\begin{cases}s\phi^{s-1}, & 0\le\phi\le 1,\\ 0, & 其余;\end{cases} \tag{B.26}$$

$\phi_i(2\le i\le s-1)$ 有密度

$$p_i(\phi)=\begin{cases}\dfrac{\pi\sin^{s-i}(\pi\phi)}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{s-i+1}{2}\right)}, & 若\ 0\le\phi\le 1,\\ 0, & 其余,\end{cases} \tag{B.27}$$

以及 $\phi_s \sim U(0,1)$.

现在我们来处理积分

$$I_3 = \int_{U_s} f(\boldsymbol{x})\, dv,$$

这里 dv 为 U_s 的体积元. 作球坐标变换 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_3(\boldsymbol{\phi})$ 如下

$$\begin{cases} x_1 = \cos(\pi\phi_1), \\ x_2 = \sin(\pi\phi_1)\cos(\pi\phi_2), \\ \quad \cdots \\ x_{s-1} = \sin(\pi\phi_1)\cdots\sin(\pi\phi_{s-2})\cos(2\pi\phi_{s-1}), \\ x_s = \sin(\pi\phi_1)\cdots\sin(\pi\phi_{s-2})\sin(2\pi\phi_{s-1}). \end{cases} \tag{B.28}$$

我们要指出 $\boldsymbol{x}$ 到 $\boldsymbol{\phi}$ 变换的雅可比为

$$J_3(\boldsymbol{\phi}) = \det(\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}')^{1/2} = 2\pi^{s-1}\prod_{i=1}^{s-2}\sin^{s-i-1}(\pi\phi_i). \tag{B.29}$$

当然, 我们可以用归纳法直接计算 $\det(\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}')^{1/2}$, 但是, 下面的方法似乎更为简单. 首先, 令

$$\begin{cases} x_i = y_i, \qquad i = 1,\cdots,s-1, \\ x_s^2 = 1 - y_1^2 - \cdots - y_{s-1}^2 \end{cases}$$

及

$$\boldsymbol{H} = \left(\frac{\partial x_j}{\partial y_i}\right), \qquad i = 1,\cdots,s-1, \quad j = 1,\cdots,s.$$

不难发现 $\boldsymbol{H} = (\boldsymbol{I}_{s-1}, -\boldsymbol{y}/x_s)$ 其中 $\boldsymbol{y} = (y_1,\cdots,y_{s-1})'$. 因此

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}')^{1/2} &= \det(\boldsymbol{I}_{s-1} + \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}'/x_s^2)^{1/2} \\ &= \det(\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}' + \boldsymbol{P}\boldsymbol{y}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{y})'/x_s^2)^{1/2}, \end{aligned}$$

这里 $\boldsymbol{P}$ 为 $(s-1)$ 阶正交阵以及 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{y} = (\|\boldsymbol{y}\|, 0,\cdots,0)'$, 和

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}')^{1/2} &= \det(\boldsymbol{I}_{s-1} + \mathrm{diag}(\|\boldsymbol{y}\|^2/x_s^2, 0,\cdots,0))^{1/2} \\ &= \left[1 + \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}/(1-\boldsymbol{y}'\boldsymbol{y})\right]^{1/2} \quad (\text{当 } x_s^2 = 1 - \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}) \\ &= 1/(1-\boldsymbol{y}'\boldsymbol{y})^{1/2} = 1/|x_s|. \end{aligned}$$

由 (B.4) 和 (B.7) 得

$$I_3 = \int_{U_s} f(\boldsymbol{x})\,dv = \int_{B_{s-1}} f(\boldsymbol{y}, x_s)/|x_s|\,d\boldsymbol{y},$$
$$x_s = \pm\sqrt{1-\boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}}.$$

对 $\boldsymbol{y}$ 作 (B.28) 中的前 $s-1$ 个变换，它将 C^{s-1} 映象至 B_{s-1}，即

$$\begin{cases} y_1 = \cos(\pi\phi_1), \\ y_2 = \sin(\pi\phi_1)\cos(\pi\phi_2), \\ \quad\cdots \\ y_{s-1} = \sin(\pi\phi_1)\cdots\sin(\pi\phi_{s-2})\sin(2\pi\phi_{s-1}), \end{cases}$$

其中 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_{s-1})' \in C^{s-1}$. 矩阵 $(\frac{\partial y_i}{\partial \phi_j})$ 是三角的，故变换的雅可比为

$$\begin{aligned} \det\left(\frac{\partial y_i}{\partial \phi_j}\right)_+ &= \prod_{i=1}^{s-1} \frac{\partial y_i}{\partial \phi_i} \\ &= 2\pi^{s-1} \prod_{j=1}^{s-2} \sin^{s-j}(\pi\phi_j)\sin(2\pi\phi_{s-1}) \\ &= J_1 \text{ (say)}. \end{aligned}$$

因此

$$I_3 = \int_{C^{s-1}} f(\boldsymbol{x}_3(\boldsymbol{\phi}))J_1/|x_s|\,d\boldsymbol{\phi}, \tag{B.30}$$

其中

$$J_1/|x_s| = 2\pi^{s-1} \prod_{j=1}^{s-2} \sin^{s-j-1}(\pi\phi_j)$$

是欲求的 $J_3(\boldsymbol{\phi})$. 当 $f \equiv 1$ 时，从 (B.30) 我们得

$$\begin{aligned} v(U_s) &= \int_{C^{s-1}} 2\pi^{s-1} \prod_{j=1}^{s-2} \sin^{s-j-1}(\pi\phi_j)\, d\phi_j \\ &= 2\pi \prod_{j=1}^{s-2} \left[\pi \int_0^1 \sin^{s-j-1}(\pi\phi)\, d\phi\right] \\ &= 2\pi \prod_{j=1}^{s-2} B\Big(\frac{1}{2}, \frac{s-j}{2}\Big) \\ &= \frac{2\pi^{s/2}}{\Gamma(s/2)}. \end{aligned} \tag{B.31}$$

设 $\boldsymbol{x} = (X_1, \cdots, X_s)$ 在 U_s 上均匀分布， $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_{s-1})$ 如 (B.28) 所定义. 由类似地处理 U_s 的方式我们获得

(a) $\phi_1, \cdots, \phi_{s-1}$ 相互独立；

(b) $\phi_j (1 \le j \le s-1)$ 有 p.d.f.

$$p_j(\phi) = \frac{\pi}{B(\frac{1}{2}, \frac{s-j}{2})} \sin^{s-j-1}(\pi\phi), \qquad 0 \le \phi \le 1. \tag{B.32}$$

在结束本节之前，我们要讨论在 (B.27) 和 (B.32) 中出现的分布.

令 X_m 是一个随机变量，有 p.d.f.

$$p_m(x) = \begin{cases} \dfrac{\pi}{B(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})} \sin^{m-1}(\pi x), & 0 \le x \le 1, \\ 0, & \text{其余}, \end{cases} \tag{B.33}$$

当 m 为正整数时，有如下之性质：

(a) 当 $m = 1$, $X_m \sim U(0,1)$, 服从均匀分布.

(b) 令 $Z = \sin^2(\pi X_m)$ 是一非负随机变量，则 $Z \sim \mathrm{Be}(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})$, 其中右端为贝塔分布，其参数为 $m/2$ 和 $1/2$.

说明 若此处改为 $\frac{1}{2}\sin^2(\pi X_m)$, 后面的计算由 X_m 反到 2 时有 $\frac{1}{2}$ 因子，遇到困难更大. 这里的结论是对的，由于 X_m 和 Z 不是

一一对应，两个 X_m 对应到一个 Z，故讨论时要分开 $0 \le X_m < \frac{1}{2}$ 和 $\frac{1}{2} \le X_m < 1$ 来进行，两者合并时乘一个 2.

事实上，X_m 的 p.d.f. 已由 (B.33) 给出. 作变换 $Z = \sin^2(\pi X_m)$，则相应的雅可比为

$$J(z \to x_m) = |2\pi \sin(\pi x_m)\cos(\pi x_m)|$$
$$= 2\pi z^{1/2}(1-z)^{1/2}.$$

由于 X_m 和 Z 不是一一对应，故应将 X_m 分成两个区间 $0 \le X_m < \frac{1}{2}$ 和 $\frac{1}{2} \le X_m < 1$ 来讨论，它们所获得 Z 的相应密度相同，故 Z 的 p.d.f. 应再乘 2，即

$$2 \cdot \frac{\pi}{B(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})} z^{\frac{(m-1)}{2}} \frac{1}{2\pi z^{1/2}(1-z)^{1/2}}$$
$$= \frac{1}{B(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})} z^{\frac{m}{2}-1}(1-z)^{1/2-1}, \qquad 0 \le z \le 1,$$

即 $Z \sim \mathrm{Be}\,(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})$.

(c) 令 $F_m(x)$ 为 X_m 的分布函数，则 $F_m(x)$ 可以通过不完全贝塔函数表出. 令

$$B_x(\alpha, \beta) = \int_0^x y^{\alpha-1}(1-y)^{\beta-1}\,dy,$$
$$\alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad 0 \le x \le 1$$

为不完全贝塔函数，及

$$I_x(\alpha, \beta) = B_x(\alpha, \beta)/B(\alpha, \beta).$$

为不完全贝塔比. 当 $0 \le x \le 1$ 时，有

$$F_m(x) = \frac{\pi}{B(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})} \int_0^x \sin^{m-1}(\pi\phi)\,d\phi$$
$$= \frac{1}{B(\frac{m}{2}, \frac{1}{2})} \int_0^{\pi x} \sin^{m-1}\theta d\theta \qquad (\theta = \pi\phi),$$

从而得

(i) $0 \le x \le \frac{1}{2}$: 令 $y = \sin\theta$, 有

$$dy = \cos\theta\, d\theta = (1-y^2)^{1/2}\, d\theta$$

从而

$$\begin{aligned} F_m(x) &= \frac{1}{B(\frac{m}{2},\frac{1}{2})}\int_0^{\sin(\pi x)} y^{m-1}(1-y^2)^{-\frac{1}{2}}\, dy \qquad (z=y^2) \\ &= \frac{1}{2B(\frac{m}{2},\frac{1}{2})}\int_0^{\sin^2(\pi x)} z^{\frac{m}{2}-1}(1-z)^{\frac{1}{2}-1}\, dz \\ &= \frac{1}{2} I_{\sin^2(\pi x)}\left(\frac{m}{2},\frac{1}{2}\right); \end{aligned} \tag{B.34}$$

(ii) $\frac{1}{2} \le x \le 1$: 由类似方法可得

$$\begin{aligned} F_m(x) &= \frac{1}{2} I_{\cos^2(\pi x)}\left(\frac{1}{2},\frac{m}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} I_{\sin^2(\pi x)}\left(\frac{m}{2},\frac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{B.35}$$

因为

$$I_x(\alpha,\beta) = 1 - I_{1-x}(\beta,\alpha).$$

因此，通过不完全贝塔逆函数我们能求得 $F_m^{-1}(x)$, 后者在产生 B_s 和 U_s 的 NT-net 时是需要的. 当然，如果运用 §4.3 的方法，可避免计算 $F_m^{-1}(x)$.

B.3 区域 V_s 和 T_s

令 V_s 和 T_s 分布为 R^s 中的 l_1- 球和 l_1- 球面，即

$$V_s = \left\{(x_1,\cdots,x_s):\ x_i \ge 0,\ i=1,\cdots,s,\ \sum_{i=1}^{s} x_i \le 1\right\} \tag{B.36}$$

和

$$T_s = \left\{(x_1,\cdots,x_s):\ x_i \ge 0,\ i=1,\cdots,s,\ \sum_{i=1}^{s} x_i = 1\right\}. \tag{B.37}$$

考虑积分

$$I_4 = \int_{V_s} f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}.$$

变换 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_4(\boldsymbol{\phi})$

$$\begin{cases} x_i = \phi_1 \prod_{j=2}^{i} \sin^2\left(\dfrac{\pi\phi_j}{2}\right) \cos\left(\dfrac{\pi\phi_{i+1}}{2}\right), \\ \qquad\qquad i = 1, \cdots, s-1, \\ x_s = \phi_1 \prod_{j=2}^{s} \sin^2\left(\dfrac{\pi\phi_j}{2}\right), \end{cases} \tag{B.38}$$

将 C^s 映象到 V_s, 其中 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_s) \in C^s$. 为了应用引理 B.1 至 (B.38), 运用如下的关系式:

$$\begin{cases} x_s = \phi_1 \prod_{j=2}^{s} \sin^2\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right), \\ x_{s-1} + x_s = \phi_1 \prod_{j=2}^{s-1} \sin^2\left(\dfrac{\pi\phi_j}{2}\right), \\ \qquad \cdots \\ x_2 + \cdots + x_s = \phi_1 \sin^2\left(\frac{\pi\phi_2}{2}\right), \\ x_1 + \cdots + x_s = \phi_1. \end{cases}$$

变换 (B.38) 的雅可比为

$$J_4(\boldsymbol{\phi}) = \prod_{i=1}^{s} J(x_i \to \phi_i),$$

其中当 $2 \le i \le s$ 时

$$J(x_i \to \phi_i) = \phi_1 \pi \sin\left(\frac{\pi\phi_i}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi\phi_i}{2}\right) \prod_{j=2}^{i-1} \sin^2\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)$$

及

$$J(x_1 \to \phi_1) = 1.$$

因此

$$J_4(\boldsymbol{\phi}) = (\pi\phi_1)^{s-1}\prod_{j=2}^{s}\sin^{2(s-j)+1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right), \tag{B.39}$$

和

$$I_4 = \int_{C^s} f(\boldsymbol{x}_4(\boldsymbol{\phi}))J_4(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}. \tag{B.40}$$

特别,

$$\begin{aligned} v(V_s) &= \int_{C^s} J_4(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi} \\ &= \int_0^1 \phi_1^{s-1}\,d\phi_1 \\ &\quad \times \prod_{j=2}^{s}\pi\int_0^1 \sin^{2(s-j)+1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)d\phi_j \\ &= 1/s!. \end{aligned} \tag{B.41}$$

令 $\boldsymbol{x}=(X_1,\cdots,X_s)$ 在 V_s 上均匀分布, 则 $\boldsymbol{x}$ 的 p.d.f. 为

$$p_4(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} s!, & 若\ \boldsymbol{x}\in V_s, \\ 0, & 其余, \end{cases}$$

对 $\boldsymbol{x}$ 作变换 (B.38), 则 $\phi_1,\cdots,\phi_s$ 的密度为

$$s!\,J_4(\boldsymbol{\phi}) = s\phi_1^{s-1}\prod_{j=2}^{s}\left[\pi(s-j+1)\sin^{2(s-j)+1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\right]$$

这表明:

(a) $\phi_1,\cdots,\phi_s$ 相互独立;

(b) ϕ_j 的 p.d.f. 和 c.d.f. 分别为

$$p_j(x) = \begin{cases} s\phi^{s-1}, & 若\ j=1, \\ \pi(s-j+1)\sin^{2(s-j)+1}\left(\frac{\pi\phi}{2}\right) & \\ \quad\times\cos\left(\frac{\pi\phi}{2}\right), & 若\ 2\le j\le s \end{cases} \tag{B.42}$$

和

$$F_j(\phi)=\begin{cases}\phi^s, & 若\ j=1,\\ \sin^{2(s-j+1)}\left(\dfrac{\pi\phi}{2}\right), & 若\ 2\le j\le s,\end{cases} \tag{B.43}$$

其中 $0\le\phi\le 1$.

考虑积分

$$I_5=\int_{T_s} f(\boldsymbol{x})\,dv,$$

这里 dv 为 T_s 的体积元. 作变换 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_5(\boldsymbol{\phi})$, 其中

$$\begin{cases} x_i=\prod\limits_{j=1}^{i-1}\sin^2\left(\dfrac{\pi\phi_j}{2}\right)\cos^2\left(\dfrac{\pi\phi_i}{2}\right), & i=1,\cdots,s-1,\\ x_s=\prod\limits_{j=1}^{s}\sin^2\left(\dfrac{\pi\phi_j}{2}\right). \end{cases} \tag{B.44}$$

我们来证明该变换的雅可比为

$$J_5(\boldsymbol{\phi})=\sqrt{s}\,\pi^{s-1}\prod_{j=1}^{s-1}\sin^{2(s-j)-1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right). \tag{B.45}$$

从而

$$I_5=\int_{C^{s-1}} f(\boldsymbol{x}_5(\boldsymbol{\phi}))J_5(\boldsymbol{\phi})\,d\boldsymbol{\phi}.$$

首先我们作如下变换将 V_{s-1} 映象至 T_s

$$\begin{cases} x_i=y_i, & i=1,\cdots,s-1,\\ x_s=1-y_1-\cdots-y_{s-1}. \end{cases}$$

容易指出

$$\boldsymbol{H}=\left(\frac{\partial x_j}{\partial y_i}\right)=(\boldsymbol{I}_{s-1},\ -\mathbf{1}_{s-1}),\qquad \mathbf{1}_{s-1}=(1,\cdots,1)'$$

从而

$$\begin{aligned}\det(\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}')^{1/2}&=\det(\boldsymbol{I}_{s-1}+\mathbf{1}_{s-1}\mathbf{1}_{s-1}')^{1/2}\\ &=(1+\mathbf{1}_{s-1}'\mathbf{1}_{s-1})^{1/2}=\sqrt{s}.\end{aligned}$$

因此我们有

$$I_5 = \sqrt{s} \int_{V_{s-1}} f(\boldsymbol{y}, 1 - \|\boldsymbol{y}\|) d\boldsymbol{y},$$

其中 $\|\boldsymbol{y}\| = \sum_{i=1}^{s-1} y_i$ 是 $\boldsymbol{y}$ 的 l_1- 模. 其次，我们取 (B.44) 中的前 $s-1$ 个变换，它将 C^{s-1} 映象为 V_{s-1}. 变换的雅可比矩阵 $(\frac{\partial y_i}{\partial \phi_i})$ 是三角的，从而雅可比为

$$\begin{aligned}
\det\left(\frac{\partial y_j}{\partial \phi_i}\right)_+ &= \prod_{i=1}^{s-1} \frac{\partial y_i}{\partial \phi_i} \\
&= \prod_{i=1}^{s-1} 2\frac{\pi}{2} \prod_{j=2}^{i-1} \sin^2\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi\phi_i}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi\phi_i}{2}\right) \\
&= \pi^{s-1} \prod_{j=1}^{s-1} \sin^{2(s-j)-1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right).
\end{aligned}$$

它蕴涵着 (B.44) 和 (B.45).

T_s 的体积为

$$\begin{aligned}
v(T_s) &= \int_{C^{s-1}} J_5(\boldsymbol{\phi})\, d\boldsymbol{\phi} \\
&= \sqrt{s} \prod_{j=1}^{s-1} \pi \int_0^1 \sin^{2(s-j)-1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right) d\phi_j \\
&= \sqrt{s}/(s-1)!.
\end{aligned}$$

令 $\boldsymbol{x} = (X_1, \cdots, X_s)$ 在 T_s 上均匀分布，$\boldsymbol{x}$ 在 T_s 上的 p.d.f. 为

$$p_5(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} (s-1)!/\sqrt{s}, & \text{若 } \boldsymbol{x} \in T_s, \\ 0, & \text{其余}. \end{cases}$$

对 $\boldsymbol{x}$ 作变换 (B.44), 则 $\phi_1, \cdots, \phi_{s-1}$ 的 p.d.f. 为

$$\begin{aligned}
&p_5(\boldsymbol{x}_5(\boldsymbol{\phi}))J_5(\boldsymbol{\phi}) \\
=&\frac{(s-1)!}{\sqrt{s}} \sqrt{s}\pi^{s-1} \prod_{j=1}^{s-1} \sin^{2(s-j)-1}\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi\phi_j}{2}\right)
\end{aligned}$$

这表明

(a) $\phi_1, \cdots, \phi_s$ 相互独立；

(b) ϕ_j 的 p.d.f. 和 c.d.f. 分别为

$$p_j(\phi) = \pi(s-j)\sin^{2(s-j)-1}\left(\frac{\pi\phi}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi\phi}{2}\right), \quad 0 \le \phi \le 1 \tag{B.46}$$

和

$$F_j(\phi) = \sin^{2(s-j)}\left(\frac{\pi\phi}{2}\right), \qquad 0 \le \phi \le 1. \tag{B.47}$$

参 考 文 献

Abut, H., Gray, R.M. and Rebolledo, G. (1982), Vector quantization of speech and speech-like waveforms, *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing*, **ASSP-30**, 423–435.

Aitchison, J. (1986), *The Statistical Analysis of Compositional Data*, Chapman and Hall, London/New York.

Allgower, E. and Georg, K. (1980), Simplicial and continuation method for approximating fixed points and solutions to systems of equations, *SIMA Review*, **22**, 28–85.

Amari, S. -I. (1985), *Differential-Geometrical Methods in Statistics*, Lecture Notes in Statistics, **28**, Springer-Verlag, New York.

Amari, S. -I.; Barndorff-Nielsen, O.E., Kass, R.E.; Lauritzen, S.L. and Rao, C.R. (1987), *Differential Geometry in Statistical Inference*, IMS, Hayward, California.

Anderberg, M.R. (1973), Cluster Analysis for Applications, New York, Academic Press.

Anderson, E. (1935), The irises of the Gaspe Peninsula, Bull. Am. Iric Soc. **59**, 2–5.

Anderson, T.W. (1984), *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, 2nd edition, Wiley, New York.

Anderson, T.W., Olkin, I., and Underhill, L.G. (1987), Generation of random orthogonal matrices, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, **8**, 625–629.

Andrews, D. F. (1972), Plots of high-dimensional data, *Biometrics*, **28**, 125–136.

Arnold, B.C. and Balakrishnan, N. (1989), Relations, Bounds and Approximations for Order Statistics, Springer-Verlag, New York.

Avriel, M. (1976), *Nonlinear Programming, Analysis and Applications*, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey.

Baker, A. (1965), On some Diophantine inequalities involving the exponential function, *Canad. J. Math.*, **17**, 616–626.

Baringhaus, L. and Henze, N. (1988), A consistent test for multivariate normality based on the empirical characteristic function, *Metrika*, **35**, 339–348.

Bentler, P.M. (1980), Multivariate analysis with latent variables: causal modeling, *Annual Review of Psychology*, **31**, 419–456.

Bera, A. and John, S. (1983), Tests for Multivariate normality with Pearson alternatives, *Commun. Statist.-Theor. Meth.*, **12**, 103–117.

Bernardo, M.C., Buck, R., Liu, L., Nazaret, W.A., Sacks, J. and Welch, W.J. (1992), Integrated circuit design optimization using a sequential strategy, *IEEE Trans, on Computer – Aided Design*, **11**, 361–372.

Bertsimas, D. and Tsitsiklis, J. (1993), Simulated annealing, *Statistical Science*, **8**, 10–15.

Bickel, P.J. (1964), On some alternative estimates for shift in the p-variate one-sample problem, *Ann. Math. Statist.*, **35**, 1079–1090.

Bofinger, E. (1970), Maximizing the correlation of grouped observations, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **65**, 1632–1638.

Boot, J.C.G. (1964), *Quadratic Programming*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam.

Bouleau, N. (1990), On effective computation of expectations in large or infinite dimensions, *J. Comput. Appl. Math.*, **31**, 23–34.

Braaten, E. and Weller, G. (1979), An improved low-discrepancy sequence for multidimensional Quasi-Monte-Carlo integration, *J. Comp. Physics*, **33**, 249–258.

Brent, R.P. (1973), Some efficient algorithms for solving systems of nonlinear equations, *SIAM, J. Numer. Anal.*, **10**, 327–344.

Brown, K.M. (1967), Solution of simultaneous nonlinear equations, *Comm. ACM*, **10**, 728–729.

Bundschuh, P. and 朱尧辰 (Zhu, Y.C.) (1992), A method for exact calculation of the discrepancy of low-dimensional finite point sets (I), Adhandlungen aus dem Math. Seminar der Univ. Hamburg, Bd. 63.

Cambanis, S. and Gerr, N.L. (1983), A simple class of asymptotically optimal quantizers, *IEEE Trans. Inform Theory*, **IT-29**, 664–676.

曹素元 (Cao, S.Y.) (1992), Discussion on estimates in l_1-norm regression and number-theoretic method, *International Symposium on Multivariate Analysis and Its Applications*, Hong Kong.

成平 (Cheng, P.) (1983), 应用数学问题征解, 数学实践与认识, **2**, 79.

成平, 施沛德, 朱力行, 魏刚 (Cheng, P., Shi, P.D., Zhu, L.X. and Wei, G.) (1991), On the life of sphere roller, *Acta Math. Sci.*, **11**, 308–316.

庄威彪 (Chong, W.P.) (1991), Representative points univariate continuous distributions — A number-theoretic method approach, *BSC thesis*, Hong Kong Baptist College.

钟开莱 (Chung, K.L.) (1949), An estimate concerning the Kolmogoroff limit distribution, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **67**, 36–50.

Cohen, A.C. (1965), Maximum likelihood estimation in the Weibull distribution based on complete and on censored samples, *Technometrics*, **7**, 579–588.

Cornell, J.A. (1973), Experiments with mixtures: A review, *Technometrics*, **15**, 437–455.

Cornell, J.A. (1975), Some comments on designs for Cox's mixture polynomial, *Technometrics*, **17**, 25–35.

Cornell, J.A. (1981), *Experiments with Mixtures, Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data*, New York: Wiley.

Cox, D.R. (1957), Note on grouping, *J. Amer. Stat. Assoc.*, **52**, 543–547.

Cox, D.R. (1971), A note on polynomial response functions for mixtures, *Biometrika*, **58**, 155–159.

Cox, D.R. and Small, N.J.H. (1978), Testing multivariate normality, *Biometrika*, **65**, 263–272.

Cranley, R. and Patterson, T.N.L. (1976), Randomization of number theoretic methods for multiple integration, *Siam J. Numer. Anal.*, **13**, 904–914.

Csörgö, S. (1986), Test for normality in arbitrary dimension, *Ann. Statist.*, **14**, 708–723.

Csörgö, S. (1989), Consistency of some tests for multivariate normality, *Metrika*, **36**, 107–116.

David, H.A. (1981), *Order Statistics*, 2nd Edition, Wiley, New York.

Davis P.J. and Rabinowitz P. (1984), *Methods of numerical integrations*, Academic Press, New York.

邓乃扬 (Deng, N.Y.) (1988), 无约束的最优化数值方法, 科学出版社, 北京.

Dennis, J.E. and Moré, J.J. (1977), Quasi-Newton methods, motivation and theory, *SIAM Review*, **19**, 46–89.

Diaconis, P. (1989), Group Representations in Probability and Statistics, IMS Lecture Notes-Monograph Series; Vol. 11, Hayward, California.

丁元 (Ding, Y.) (1986), 均匀设计统计优良性初探, 应用概率统计, **2**, 153–160.

Dixon, L.C.W. (1972), Quasi-Newton algorithms generate identical points, *Math. Prog.*, **2**, 383–387.

Dixon, L.C.W. and Szego, G.P. (eds) (1975), *Towards Global Optimization*, North-Holland, Amsterdam.

Draper, N.R., and Lawrence, W.E. (1965), Mixture designs for three factors, *J. Royal Statist. Soc. B*, **27**, 450–465.

Draper, N.R., and Lin, D.K.J. (1990), Small response-surface designs, *Technometrics*, **32**, 187–194.

Dubey, S.D. (1967), Some percentile estimators for Weibull parameters, *Technometrics*, **9**, 119–129.

Eaton, M.L. (1989), *Group Invariance Applications in Statistics*, CBMS Regional Conference Series in Probability and Statistics, Vol. 1, IMS, Hayward, California.

Efron, B. (1975), Defining the curvature of a statistical problem with applications to second-order efficiency (with discussion), *Ann. Statist.* **3**, 1189–1242.

方开泰 (Fang, K.T.) (1980), 均匀设计 —— 数论方法在试验设计的应用, 应用数学学报, **3**, 363–372.

方开泰与 Anderson (Fang, K.T. and Anderson, T.W.) (1990), *Statistical Inference in Elliptically Contoured and Related Distributions*, Allenton Press, New York.

方开泰与方碧棋 (Fang, K.T. and Fang, B.Q.) (1988), Some families of multivariate symmetric distributions related to exponential distribution, *J. Multivariate Analysis*, **24**, 109–122.

方开泰与贺曙东 (Fang, K.T. and He, S.D.) (1982), The problem of selecting a given number of representative points in a normal population and a generalized Mill's ratio, *Technical Report No.5, U.S. Army Research Office Contract DAAG 29-82-K-0156, Department of Statistics, Stanford University, California*.

方开泰与贺曙东 (Fang, K.T. and He, S.D.) (1984), 在正态总体中如何选择给定数目的代表点的问题，应用数学学报, **7**, 293–306.

方开泰与贺曙东 (Fang, K.T. and He, S.D.) (1985), Regression models with linear constraints and nonnegative regression coefficients, *Math. Numer. Sinica*, **7**, 237–246.

方开泰，Kotz, S. K 与吴启宏 (Fang, K.T., Kotz, S. and Ng, K.W.) (1990), *Symmetric Multivariate and Related Distributions*, Chapman and Hall, London/New York.

方开泰，Kotz 与吴启宏 (Fang, K.T., Kotz, S. and Ng, K.W.) (1992), *On l_1-norm distributions, l_1-Statistical Analysis and Related Methods* (ed. by Y. Dodge), North-Holland.

方开泰与李润泽 (Fang, K.T. and Li, R.Z.) (1992), An algorithm for generating a set of matrices uniformly scattered on the Stiefel manifold, to be submitted.

方开泰，全辉与陈庆云 (Fang, K.T., Quan, H. and Chen, Q.Y.) (1988), 实用回归分析，科学出版社，北京.

方开泰，王东谦与吴国富 (Fang, K.T., Wang, D.Q., and Wu, G.F.) (1982), 一类带约束的回归 —— 配方回归，计算数学, **4**, 57–69.

方开泰与王元 (Fang, K.T. and Wang, Y.) (1990), A sequential algorithm for optimization and its applications to regression analysis, in *Lecture Notes in Contemporary Mathematics*, eds by Yang, L. and Wang, Y., Science Press, 17–28.

方开泰与王元 (Fang, K.T. and Wang, Y.) (1991), A sequential algorithm for solving a system of nonlinear equations, *J. Comp. Math.*, **9**, 9–16.

方开泰，王元与 Bentler (Fang, K.T., Wang, Y. and Bentler, P.M.) (1992), Applications of number-theoretic method in multivariate statistics, invited talk in *the International Symposium on Multivariate Analysis and Its Applications*, Hong Kong.

方开泰，王元与黄开林 (Fang, K.T., Wang, Y. and Wong, K.L.) (1992), A new method of generating an NT-net on the unit sphere, *Technical Report*

MATH-002, Hong Kong Baptist College.

方开泰，王元与袁克海 (Fang, K.T., Wang Y. and Yuan K.H.) (1990), Quantizer and quasirandom F-number sequence of multivariate continuous distribution, *Technical Report*, **004**, Institute of Applied Mathematics, Academia Sinica, Beijing.

方开泰与魏刚 (Fang, K.T. and Wei, G.) (1989), The applications of number theoretic method to some geometric probability problems in statistics, *The Third Japan-China Symposium on Statistics*, Contributed Papers, Tokyo, 42–45.

方开泰与魏刚 (Fang, K.T. and Wei, G.) (1992), 一个特殊"首达时刻"的分布，应用数学学报, **15**, 460—467.

方开泰与吴传义 (Fang, K.T. and Wu, C.Y.) (1979), 一个概率极值问题，应用数学学报, **2**, 132-148.

方开泰与袁克海 (Fang, K.T. and Yuan, K.H.) (1990), 统一处理极大似然估计的一个方法，应用概率与统计, **6**, 412–418.

方开泰，袁克海与 Bentler (Fang, K.T. Yuan, K.H. and Bentler, P.M.) (1990), Quantizer and representative points of elliptically contoured distributions, invited talk in "The First Conference on Recent Developments in Statistical Research", Hong Kong.

方开泰，袁克海与 Bentler (Fang, K.T., Yuan, K.H. and Bentler, P.M.) (1992), Applications of sets of points uniformly distributed on a sphere to testing multinormality and robust estimation, in *Probability and Statistics*, eds by Jiang, Z.P., Yan, S.J., Cheng, P. and Wu. R. World Scientific, 56–73.

方开泰与张金廷 (Fang, K.T. and Zhang, J.T.) (1990), 非线性回归模型参数估计的一个新算法，应用数学学报. **16**, 366–377.

方开泰与张金廷 (Fang, K.T. and Zhang, J.T.) (1992), Criteria for uniform design, Technical Report MATH–002, Hong Kong Baptist College.

方开泰与张尧庭 (Fang, K.T. and Zhang, Y.T.) (1990), *Generalized Multivariate Analysis*, Springer-Verlag and Science Press, Berlin and Beijing.

方开泰与郑胡灵 (Fang, K.T. and Zhen, H.N.) (1992), 均匀性的新度量 —— 最大对称差准则，应用概率统计, **8**, 10–18.

方开泰与朱力行 (Fang, K.T. and Zhu, L.X.) (1993), On uniformly random design, *Technical report* MATH-020, Hong Kong Baptist College.

方开泰，朱力行与 Bentler (Fang, K.T., Zhu, L.X. and Bentler, P.M.) (1993), A necessary test of goodness of fit for sphericity, *J. Multivariate Analysis*, 44, 34–55.

Faure, H. (1982), Discrépance associée à un Système de Numération (en dimensions), *Acta Arithmetica*, **XL1**, 337-361.

Fejes Toth, L. (1959), Sur la representation d'une population infinie par un nombre fini d'elements, *Acta Math. Acad. Scient. Hung.*, **10**, 299–304.

冯果忱 (Feng, G.C.) (1989), *Iterctive Methods of A System of Nonlinear Equations*, Shanghai Press of Science and Technology, Shanghai.

Ferrari, P.A., Frigessi, A. and Schonmann, R.H. (1993), Convergence of some partially parallel Gibbs samplers with annealing, *Ann. Appl. Prob.*, **3**, 137–153.

Fisher, R.A. (1936), The use of multiple measurements in taxonomic problems, *Ann. Eugenics*, **VII**, 179–188.

Fischer, T.R. (1986), A pyramid vector quantizer, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-32**, 568–583.

Fischer, T.R. (1989), Geometric source coding and vector quantization, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-35**, 137–145.

Fischer, T.R. and Dicharry, R.M. (1984), Vector quantizer design for memoryless Gaussian, gamma, and Laplacian sources, *IEEE Trans. Commun.*, **COM-32**, 1065–1069.

Fletcher, R. (1987), *Practical Methods of Optimization*, 2nd Edition, Wiley, New York.

Friedman, J.H. and Tukey, J.W. (1974), A projection pursuit algorithm for exploratory data analysis, *IEEE Trans. Comput.* **C-23**, 881–889.

傅全 (Fu, J.C.) (1989), Method of Kim Zam —— An algorithm for computing the maximum likelihood, estimator, *Statistics & Probability letters*, **8**, 289–296.

Gasko, M. and Donoho, D. (1982), Influential in data analysis, Missing observation, in *Proceedings of the Business and Economic Statistics Section*, American Statistical Association, 104–109.

Gelfand, A.E., Hills, S.E., Racine-Poon, A. and Simith, A.F.M. (1990), Illustration of Bayesian inference in normal data models using Gibbs sampling, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **85**, 972–985.

Gentleman, W.M. (1965), Robust estimation of multivariate location by minimizing pth power deviations, Ph.D thesis, Princeton University.

Gersho, A. (1979), Asymptotically optimal block quantization, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-25**, 373–380.

Gersho, A. (1982), On the structure of vector quantizers, *IEEE Trans, Inform. Theory*, **IT-28**, 157–166.

Gersho, A. and Cuperman, V. (1983), Vector quantization: A pattern-matching technique for speech coding, *IEEE Commun. Mag.*, **21**, 15–21.

Gill, P.G., Murray, W. and Wright, M.H. (1981), *Practical Optimization*, Academic Press, London.

Gnanadesikan, R. (1977), *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations*, Wiley, New York.

Gnanadesikan, R., Pinkham, R.S., and Hughes, L.P. (1967), Maximum likelihood estimation of the parameters of the beta distribution from smallest

order statistics, *Technometrics*, **9**, 607–620.

Goldberg, D.E. (1989), *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, Addison-Wesley, Reading, Mass.

Gray, R.M. (1984), Vector quantization, *IEEE ASSP Mag.*, **1**, 4–29.

Gray, R.M. and Karnin, E.D. (1982), Multiple local optima in vector quantizers, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-28**, 256–261.

Gray, R.M. and Linde Y.L. (1982), Vector quantizers for Gauss-Markov sources, *IEEE Trans. Commun.*, **COM-30**, 381–389.

Gray, R.M., Kieffer. J. C. and Linde, Y. (1980), Locally optimal block quantizer design, *Inform. Contr.*, **45**, 178–198.

Gupta, R.D. and Richards, D. St. P. (1987), Multivariate Liouville distributions, *J. Multi. Anal.*, **23**, 233–256.

Gupta, S.S. (1963), Probability integrals of multivariate normal and multivariate t, *J. Ann. Math. Statist.*, **34**, 792–828.

Haber, S. (1970), Numerical evaluation of multiple integrals, *SIAM Rev.*, **12**, 481–526.

Haber, S. (1972), Experiments on optimal coefficients, *Applications of Number Theory to Numerical Analysis* (S.K. Zaremba, ed.), Academic Press, New York, 11–37.

Halton, J.H. (1960), On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals, *Numer. Math.*, **2**, 84–90.

Hammersley, J.M. (1960), Monte Carlo methods for solving multivariable problems, *Ann. New York Acad. Sci.*, **86**, 844–874.

Hampel, F.R., Ronchetti, E.M., Rousseeuw, P.J. and Stahel, W.A. (1986), *Robust Statistics: The Approach Based on Influence Functions*, Wiley, New York.

Harter, H.L. and Moore, A.H. (1965), Maximum likelihood estimation of the parameters of gamma and Weibull populations from complete and from censored samples, *Technometrics*, **7**, 639–643.

Hartley, H.O. (1961), The modified Gauss-Newton method for the fitting nonlinear regression function by least squares, *Technometrics*, **3**, 269–280.

Haselgrove, C.B. (1961), A method for numerical integration, *Math. Comp.*, **15**, 323–337.

Hensler, G.L., Mehrotra, K.G. and Michalek, J.E. (1977), A goodness of fit test for multivariate normality, *Commun. Statist.-Theor. Math.*, **6**, 33–41.

Hlawka, E. (1961), Funktionen von beschränkter variation in der Theorie Gleichverteilung, *Ann Mat. pure Appl.*, **54**, 325–333.

Hlawka, E. (1962), Zur angenäherten Berechnung mehrfacher Integrale, *Monatsh, Math.*, **66**, 140–151.

Hlawka, E. (1964), Uniform distribution modulo 1 and numerical analysis, *Compositio Math.*, **16**, 92–105.

Hlawka, E. (1990), *Selecta*, Springer-Verlag, Berlin.

Hlawka, E. and Muck, R. (1972), A transformation of equidistributed sequences, in *"Applications of Number Theory to Numerical Analysis"* (Zaremba, S.K. ed), Academic Press, New York, 371–388.

Horst, R. and Tuy, H. (1990), *Global Optimization: Deterministic Approaches*, Springer-Verlag, Berlin.

Horswell, R.L. and Looney, S.W. (1992), A comparison of tests for multivariate normality that are based on measures of multivariate skewness and kurtosis, *J. Statist. Comput. Simul.*, **42**, 21–38.

徐利治与周蕴时 (Hsu, L.Z. and Zhou, Y.S.) (1980), 高维数值积分，科学出版社，北京.

华罗庚 (Hua, L.K.) (1956), 数论导引, 科学出版社，北京.

华罗庚 (Hua, L.K.) (1984), 高等数学导引, 余篇，科学出版社，北京.

华罗庚与王元 (Hua, L.K. and Wang, Y.) (1960), 关于多重积分的近似计算的若干注记， 科学记录, **4**, 6–8.

华罗庚与王元 (Hua, L.K. and Wang, Y.) (1961), 积分的近似计算, 科学出版社, 北京.

华罗庚与王元 (Hua, L.K. and Wang, Y.) (1963), 数值积分及其应用, 科学出版社，北京.

华罗庚与王元 (Hua, L.K. and Wang, Y.) (1964), 丢番图逼近与数值积分， (I) 中国科学, **13**, 1007–1008; (II) 中国科学, **13**, 1009–1010.

华罗庚与王元 (Hua, L.K. and Wang, Y.) (1965), On numerical integration of periodic functions of several variables, sw Sci. Sin., **14**, 964–978.

华罗庚与王元 (Hua, L.K. and Wang, Y.) (1981), *Applications of Number Theory to Numerical Analysis*, Springer-Verlag and Science Press, Berlin and Beijing.

Huber, P.J. (1964), Robust estimation of a location parameter, *Ann. Math. Statist.*, **35**, 73–101.

Huber, P.J. (1972), Robust statistics: a review, *Ann. Math. Statist.*, **43**, 1041–1067.

Huber, P.J. (1973), Robust regression: asymptotics, conjectures and Monte Carlo, *Ann. Statist.*, **1**, 799–821.

Huber, P.J. (1985), Projection pursuit, *Ann. Statist.*, **13**, 435–475.

Iman, R.L. and Conover W.J. (1980), Small sample sensitivity analysis techniques for computer models, with an application to risk assessmen (with discussion), *Communications in statist, Part A – Theory and Methods*, **9**, 1749–1874.

Jarrett, R.G. and Morgan, B.J.T. (1984), A critical reappraisal of the Patch-Gap model, *Biometrics*, **40**, 203–207.

蒋声与陈瑞琛 (Jiang, S. and Chen, R.C.) (1987), 拉丁方型均匀设计，高校应用数学学报, **2**, 532–541.

Johnson, M.E. Moore, L.M. and Ylvisaker, D. (1990), Minimax and maximin distance designs, *J. Statist. Planning and Inference*, **26**, 131–148.

Johnson, N.L. and Kotz, S. (1972), *Distributions in Statistics: Continuous Multivariate Distributions*, Wiley, New York.

Kahaner, D. Moler, C. and Nash, S. (1989), *Numerical Methods and Software*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J.

Kendall, M.G. and Moran, P.A.P. (1963), *Geometrical Probability*, Griffin, London.

Kiefer, J. (1961), On large deviations of the empiric d.f. of vector chance variables and a law of the iterated logarithm, *Pacific J. Math.*, **11**, 649–660.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Jr. and Vecchi, M.D. (1983), Optimization by simulated annealing, *Science*, **220**, 671–680.

Korobov, N.M. (1957), Approximate calculation of multiple integrals with the aid of methods in the theory of numbers, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, **115**, 1062–1065.

Korobov, N.M. (1959a), The approximate computation of multiple integrals, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, **124**, 1207–1210.

Korobov, N.M. (1959b), Computation of multiple integrals by the method of optimal coefficients, *Vestnik Moskow Univ. Ser. Mat. Astr. Fiz. Him.*, **4**, 19–25.

Korobov, N.M. (1960), Properties and calculation of optimal coefficients, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, **132**, 1009–1012.

Korobov, N.M. (1963), *Number Theoretic Methods in Approximate Analysis*, Fizmatigiz, Moscow.

Korobov, N.M. (1989), *Trigonometric Sums and Their Applications*, Nauk, Moscow.

Koziol, J.A. (1982), A class of invariant procedures for assessing multivariate normality, *Biometrika*, **69**, 423–427.

Kuipers, L. and Niederreiter, H. (1974), *Uniform Distribution of Sequences*, Wiley, New York.

Kurker, C.M. Paulos, J.J., Gyurcsik, R.S. and Lu, J.C. (1993), Hierarchical yield estimation of large analog integrated circuits, *IEEE J. Solid State Circuits*, **28**, 203–209.

Laarhoven, van P.J.M. (1987), *Simulated Annealing: Theory and Applications*, D. Reidlt, Amsterdam.

Lai, W.Y. (1992), A hybrid Newton-like/number-theoretic optimization algorithm, the degree thesis, Hong Kong Baptist College.

Lapeyre, B. and Pagès, G. (1989), Familles de snits à discrépance faible obtenues par itérations de transformations de [0,1], *CRAS*, **308**, Série I, 507–509.

Lapeyre, B., Pagès, G. and Sab, K. (1990), Sequence with low discrepancy, generalization and application to Robbins-Monro algorithm, *Statistics*, **21**, 251–272.

李国英 (Li, G.Y.) (1985), Robust Regression, in *Exploring Data Tables, Trends and Shapes*, eds by D.C. Hoaglin, F. Mosteller, and J.W. Tukey, Wiley, New York.

李国英与查文星 (Li, G.Y. and Zha, W.X.) (1992), PP Neyman tests for multivariate goodness-of-fit, in *The Development of Statistics: Recent Contributions from China: Achivevement and Progress*, eds by Chen X. R., Fang K.T. and Yang C.C., Longman, 261–274.

Linde, Y.L., Buzo, A. and Gray, R.M.(1980), An algorithm for vector quantizer design, *IEEE Trans. Commun.*, **COM-28**, 84–95.

Lloyd, S.P. (1982), Least squares quantization in *PCM, IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-28**, 129–137.

Machado, S.G. (1983), Two statistics for testing for multivariate normality, *Biometrika*, **70**, 713–718.

MacQueen, J. (1967), Some method for classification and analysis of multivariate observations, in *Proceeding 5th Berkeley Symposium on Math. Statist. and Prob.*, **1**, 281–296.

Malkovich, J.F. and Afifi, A.A. (1973), On tests for multivariate normality, *J. Am. Statist. Assoc.*, **68**, 176–179.

Maisonneuve, D. (1972), Recherche et utillisation des "bons treillis". Programmation et résultats numériques, *Applications of Number Theory to Numerical Analysis* (S.K. Zaremba, ed.), Academic Press, New York, 121–201.

Malone, K.T. and Fisher T.R. (1988), Contour-gain vector quantization, *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing*, **ASSP-36**, 862–870.

Mardia, K.V. (1970), Measures of multivariate skewness and kurtosis with applications, *Biometrika*, **57**, 519–530.

Mardia, K.V. (1971), The effect of nonnormality on some multivariate tests and robustness to nonnormality in the linear model, *Biometrika*, **58**, 105–121.

Mardia, K.V. (1972), *Statistics of Directional Data*, Academic Press, New York.

Mardia, K.V. (1974), Applications of some measures of multivariate skewness and kurtosis for testing normality and robustness studies, *Sankhya*, **A36**, 115–128.

Mardia, K.V. (1975), Assessment of multinormality and the robustness of Hotelling's T test, *J. Roy. Statist. Soc.*, **C24**, 163–171.

Marsaglia, G. (1972), Choosing a point from the surface of a sphere, *Annalys. Math. Statist.*, **43**, 645–646.

Max, J. (1960), Quantizing for minimum distortion, *IRE Trans. Inform. Theory*, **IT-6**, 7–12.

Mckay, M.D., Beckman, R.J. and Conover, W.J. (1979), A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code, *Technometrics*, **21**, 239–245.

Menon, M.V. (1963), Estimation of the shape and scale parameters of the Weibull distribution, *Technometrics*, **5**, 175–182.

Moon, A.M. (1941), On the joint distribution of the median in samples from a multivariate population, *Ann. Math. Statist.*, **12**, 268–278.

蒙耀生 (Moon, Y.S.) (1974), Some numerical experiments on number-theoretic methods in the approximation of multi-dimensional integrals, *Tech. Rep.*, **72**, Dept. of Computer Science, Toronto Univ., Canada.

Morris, M.D. (1991), Factorial sampling plans for preliminary computational experiments, *Technometrics*, **33**, 161–174.

Müller, P. (1991), A generic approach to posterior integration and Gibbs sampling, *Technical Report* 91-09, Purdue University.

Nash, John C. and Walker-Smith, M. (1987), *Nonlinear Parameter Estimation: An Integrated System in BASIC*, Marcel Dekker Inc., New York.

Naylor, J.C. and Smith, A. F. M. (1982), Applications of a method for the efficient computation of posterior distributions, *Appl. Statist.*, **31**, 214–225.

Neyman, J. (1937), "Smooth" test for goodness of fit, *Skandinavisk Aktuanetidskrift*, **20**, 149–199. (Reprinted in *A Selection of Early Statistical Papers of J. Neyman*, Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1967).

Niederreiter, H. (1973a), Metric theorems on the distribution of sequences, *Proc. Symp. Pure Math.*, **24**, AMS Pro. R.I., 195–212.

Niederreiter, H. (1973b), *Application of Diophantine Approximations to Numerical Integration, Diophantine Approximation and Its Applications* (ed by C.F. Osgood), Academic Press, New York, 129–199.

Niederreiter, H. (1977), Pseudo-random numbers and optimal coefficients, *Advances in Math.*, **26**, 99–181.

Niederreiter, H. (1978a), Existence of good lattice points in the sense of Hlawka, *Monatsh. Math.*, **86**, 203–219.

Niederreiter, H. (1978b), Quasi-Monte Carlo methods and pseudo-random numbers, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **84**, 957–1041.

Niederreiter, H. (1983), A quasi-Monte Carlo method for the approximate computation of the extreme values of a function, *Studies in Pure Math*, Birkhauser, Basel, 523–529.

Niederreiter, H. (1987), Point sets and sequences with small discrepancy, *Monatsh. Math.*, **104**, 273–337.

Niederreiter, H. (1988a), Quasi-Monte Carlo methods for multidimensional numerical integration, *International Series of Numerical Mathematics*, Birk. Springer Verlag.

Niederreiter, H. (1988b), Low-discrepancy and low-dispersion sequences, *J. Number Theory*, **30**, 51–70.

Niederreiter, H. (1992), Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods, Soc. Industr. Appl. Math. (*SIAM*), Philadelphia.

Niederreiter, H. and McCurley, K. (1979), Optimization of functions by quasi-random search methods, *Computing*, **22**, 119–123.

Niederreiter, H. and Peart, P. (1986), Localization of search in quasi-Monte Carlo methods for global optimization, *SIAM J. Sci. Statist Computing*, **7**, 660–664.

Owen, A. (1991), Controlling correlations in latin hypercube samples, *J. Amer. Statist. Assoc.*, to appear.

Owen, A. (1992a), Acentral limit theorem for latin hypercube sampling, *J. R. Statisti Soc. B.*, **52**, 541–551.

Owen, A. (1992b), Orthogonal arrays for computer experiments, integration and visualization, *Statistica Sinica*, to appear.

Pagès, G. and Xiao, Y. J. (1991), Sequences with low discrepancy and Pseudo-random numbers, *Tec. Rep.*, Laboratoire De Mathematiques ET Modelisation, Paris.

Patel, J.K., Kapadia, C.H. and Owen, D.B. (1976), *Handbook of Statistical Distributions*, Marcel Dekker, Inc., Hew York.

Pearson, E.S. and Hartley, H.O. (1956), Biometrika Tables for Statisticians, Cambridge University Press, Cambridge.

Pollard, D. (1981), Strong consistency of k-means clustering, *Ann. Statist.*, **9**, 135–140.

Pollard, D. (1982), Quantization and the method of k-means, *IEEE Trans Inform. Theory*, **IT-28**, 199–205.

Ratkowsky, D.A. (1983), *Nonlinear Regression Modeling*, Marcel Dekker, Inc., New York.

Ratkowsky, D.A. (1990), *Handbook of Nonlinear Regression Models*, Marcel Dekker, Inc., New York.

Reilly, P.M. (1976), The numerical computation of posterior distributions, *Appl. Statist.*, **25**, 201–209.

Rincon-Gallardo, S., Quesenberry, C.P. and O'Reilly-Federico (1979), Conditional probability integral transformation and goodness-of-fit tests for multivariate distribution, *Ann. Statist.*, **7**, 1052–1057.

Rosenblatt, M. (1952), Remarks on a multivarivate transformation, *Ann. Math. Statist.*, **23**, 470–472.

Roth, K.F. (1954), On irregularities distribution, *Mathematika*, 1, 73–79.

Rousseeuw, P.J. and Leroy, A. (1987), *Robust Regression and Outlier Detection*, Wiley, New York.

Rousseeuw, P.J. and van Zomeren, B.C. (1990), Unmasking multivariate outliers and leverage points, *J. American Statist. Assoc.*, **85**, 633–639.

Roy, S.N. (1975), *Some Aspects of Multivariate Analysis*, Wiley, New York.

Royston, J.P. (1983), Some techniques for assessing multivariate normality based on the Shapiro-Wilk W., *Appl. Statist*, **32**, 121–133.

Rubinstein, R.Y. (1981), *Simulation and the Monte Carlo Method*, Wiley, New York.

Rubinstein, R.Y. (1986), *Monte Carlo Optimization, Simulation and Sensitivity of Queuing Networks*, Wiley. New York.

Sacks, J., Schiller, S.B. and Welch, W.J. (1989), Designs for computer experiments, *Technometrics*, **31**, 41–47.

Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J., and Wynn, H.P. (1989), Design and analysis of computer experiments (with discussion), *Statist. Sci.*, **4**, 409–435.

Saltykov, A.I. (1963), Tables for computing multiple integrals by the method of optimal coefficients, *Z. Vycisl. Mat. i Mat. Fiz.*, **3**, 181–186.

Scheffé, H. (1958), Experiments with mixtures, *J. Royal Statist. Soc.* B, **20**, 344–360.

Scheffé, H. (1963), The simplex-centroid design for experiments with mixtures, *J. Royal Statist. Soc. B*, **25**, 235–263.

Schmidt, W.M. (1970), Simultaneous approximation to algebraic numbers by rationals, *Acta Math.*, **125**, 189–201.

Schmidt, W.M. (1972), Irregularities of distribution, VII, *Acta Arich.*, **21**, 45–50.

Seber, G. A.F. (1977), *Linear Regression Analysis*, Wiley, New York.

Serfling, R.J. (1980), *Approximation Theorems of Mathematical Statistics*, Wiley, New York.

Shannon, C.E. (1948), A mathematical theory of communication, *Bell Syst. Tech. J.*, **27**, 379–423 and 623–656.

Sharma, D.K. (1978), Design of absolutely optimal quantizers for a wide class of distortion measures, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-24**, 693–702.

Shaw, J.E.H. (1988), A quasirandom approach to intergration in Bayesian statistics, *The Ann. Statist.*, **16**, 859–914.

史树中 (Shih, S.C.) (1980), Une generalization des 《 bons trellis 》, *C. R. Acad. Sc. Paris*, **290**, 527–530.

Sibuya, M. (1962), A method for generating uniformly distributed points on n-dimensional spheres, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **14**, 81–85.

Sirvanci, M. and Yang, G. (罗昭容) (1984), Estimation of the Weibull parameters under Type I censoring, *J. Amer. Stat. Assoc.*, **79**, 183–187.

Small. N.J.H. (1980), Marginal skewness and kurtosis in testing multivariate normality. *Appl. Statist.*, **29**, 85–87.

Smith, A.F.M. et al (1985), The implementation of the Bayesian paradign, *Commun. Statist.-Theor. Meth.*, **14**, 1079–1102.

Smith, H. and Dubey, S.D. (1964), Some reliability problems in the chemical industry, *Industrial Quality Control*, **21**, 64–70.

Snee, R.D. (1973), Techniques for the analysis of mixture data, *Technometrics*, **15**, 517–528.

Sobol, I.M. (1967), The distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals, *U.S.S.R. Comput. Math. and Math. Phys.*, **7**, 86–112.

Steck, G.P. (1962), Orthant probabilities for the equicorrelated multivariate normal distribution, *Biometrika*, **49**. 433–445.

Stein, M. (1987), Large sample properties of simulations using latin hypercube sampling, *Technometrics*, **29**, 143–151.

Stroud, A.H. (1967), Some seventh degree integration formulas for the surface of an n-sphere, *Num. Math.*, **11**, 273–276.

Stroud, A.H. (1971), *Approximate Calculation of Multiple Integrals*, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey.

Tang, B.X. (1991), OA-based Latin hypercubes, Ph.D. Proposal, Department of Statistics and Actuarial Science, University of Waterloo.

Tang, B.X. (1992), OA–based latin hypercubes, to appear in *J. Amer. Stat. Assoc.*

Tang, M.C. (1992), Mixtures of number-theoretic methods and Monte Carlo methods for optimization, the degree thesis, Hong Kong Baptist College.

Tashiro. Y. (1977), On methods for generating uniform points on the surface of a sphere, *Annals of Institute of Statistical Mathematics*, **29**, 295–300.

Teichroew, D. (1956), Tables of expected values of order statistics samples of size twenty and less from the normal distribution, *Ann. math. Statist.*, **27**, 410–420.

Thompson, W.O. and Myers, R.H. (1968), Response surface design for experiments with mixtures, *Technometrics*, **10**, 739–756.

Todd, M. (1976), *The Computation of Fixed Points and Applications*, Springer Lecture Note in Econ. and Math. Systems, Springer-Verlag, Berlin.

Tseng, H.C. and Fisher, T.R. (1987), Transform and hybrid transform/DPCM coding of images using pyramid vector quantization, *IEEE Trans. Commun*,

COM-35, 79–86.

董永良 (Tong, Y.L.) (1990), *Multivariate Normal Distributions*, Springer-Verlag, Berlin.

Tukey, J.W. (1960), A survey of sampling from contaminated distributions. In *Contributions to Probability and Statistics* (Olkin, I. et al. eds), Stanford University Press, 448–485.

Van der Corput, J.G. (1935), verteilungs funktionen, I, *Proc. Akad. Amsterdam*, **38**, 813–821.

Vasicek. O. (1976), A test for normality based on sample entropy, *J. Royal. Statist. Soc. B*, **38**, 54–59.

王学仁 (Wang, X.R.) (1982), 地质数据的多元统计方法, 科学出版社, 北京.

王元与方开泰 (Wang, Y. and Fang, K.T.) (1981), 关于均匀分布与试验设计 (数论方法), 科学通报, **26**, 65–70.

王元与方开泰 (Wang, Y. and Fang, K.T.) (1990a), Number theoretic methods in applied statistics, *Chinese Ann. Math. Ser. B*, **11**, 41–55.

王元与方开泰 (Wang, Y. and Fang, K.T.) (1990b), Number theoretic methods in applied statistics (II), *Chinese Ann. Math. Ser. B*, **11**, 859–914.

王元与方开泰 (Wang, Y. and Fang, K.T.) (1992), A sequential number-theoretic method for optimization and its applications in statistics, in *The Development of Statistics: Recent Contributions from China*, eds by Chen, X.R., Fang, K.T. and Yang, C.C., Longman Academic Scientific and Technical, London, 139–156.

王元，徐广善与张荣肖 (Wang, Y., Xu, G.S. and Zhang, R.X.) (1978, 1982), 高维数值积分的数论方法， I, 应用数学学报, **2**, 106–114; II, 412–417.

王则柯 (Wang, Z.K.) (1986), *Basic Algorithm for Fixed Points*, Publishing House of Zhongshang University.

王则柯 (Wang, Z.K.) (1987), 不动点算法，上海科技出版社，上海.

Waterman, M.S. (1974), A restricted least squares program, *Technometrics*, **16**, 135–136.

Watson, G.S. (1983), *Statistics on Spheres*, Wiley, New York.

韦博成 (Wei, B.C.) (1989), 近代非线性回归分析，东南大学出版社，南京.

Welch, W.J. (1983), A mean squared error criterion for the design of experiments, *Biometrika*, **70**, 205–213.

Welch, W.J., Buck, R.J., Sack, J., Wynn, H.P., Mitchell, T.J. and Moris, M.D. (1992), Screening, predicting, and computer experiments, *Technometrics*, **34**, 15–25.

Welch, W.J., Yu, T.K., Kang, S.M. and Sacks, J. (1990), Computer experiments for quality control by parameter design, *J. Quality Technol.*, **22**, 15–22.

Weyl, H. (1916), Über die Gleichverteilung der Zahlen mod Eins, *Math. Ann.*, **77**, 313–352.

Wilson, S.G. (1980), Magnitude/phase quantization of independent linebreak Gaussian variates, *IEEE Trans. Commun.*, **COM–28**, 1924–1929.

Wingo, D.R. (1972), Maximum likelihood estimation of the parameters of the Weibull distribution by modified quasilinearization, *IEEE Trans. Rel.*, **R-21**, 89–93.

Wolfe. P. (1969), Convergence conditions for ascent methods, *SIAM Review*, **11**, 226–235.

Wozniakowski, H. (1991), Average case complexity of multivariate integration. *Bull. Amer. Math. Soc.* **24**, 185–194.

Yamada, Y., Tazaki, S. and Gray, R.M. (1980), Asymptotic performance of block quantizers with difference distortion measures, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-26**, 6–14.

Yamauti, Z. (1972), Statistical Tables and Formulae with computer application, JSA, Tokyo.

Ylvisaker, D. (1975), Designs on random fields, in *A Survey of Statistical Design and Linear Models*, ed by J.N. Srivastava, North-Holland, Amsterdam, 593–607.

Ylvisaker, D. (1987), Prediction and design, *The Annals of Statistics*, **15**, 1–19.

Zador, P.L. (1982), Asymptotic quantization error of continuous signals and quantization dimension, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-28**, 139–149.

Zaremba, S.K. (1972), *Applications of Number Theory to Numerical Analysis*, Academic Press, New York.

张金廷 (Zhang, J.T.) (1990), Computation of moments of order statistics, *J. Graduate School*, **7**, 1–29.

张润楚 (Zhang, R.C.) (1991), Uniform design in the Stiefel Manifold and its application, Technical Report, University of Waterloo, Canada.

张润楚 (Zhang, R.C.) (1993), On design of column-orthogonal matrix with uniform distribution, *Technical Report, Series* No. Math–023, HKBC, Hong Kong.

张尧庭与方开泰 (Zhang, Y.T. and Fang, K.T.) (1983), 多元统计分析引论, 科学出版社, 北京.

Zinterhof, P. (1976), Über einige Abschätzungen bei der Approximation von Funktionen unit Gleich Verteilungs methoden, *S. B. Akad. Wiss. Math. Nat. ABt. II*, **185**, 121–132.

朱力行, 黄开林与方开泰 (Zhu, L.X., Wong, H.L., and Fang, K.T.) (1993), A test for multinormality based on sample entropy and projection pursuit, to appear in *J. Statist. Planning and Inference*.

朱尧辰 (Zhu, Y.C.) (1990), On some multi-dimensional quadrature formulas with number-theoretic nets, *Technical Report No. 047*, Institute of Applied Math., Academia Sinica, Beijing.

作 者 索 引

名 词 索 引